



**JOÃO CARLOS PACHECO NUNES**

Licenciatura em Engenharia Física

# ESPETROMETRIA DE RADIAÇÃO X PARA METROLOGIA EM PROTEÇÃO RADIOLÓGICA

MESTRADO EM ENGENHARIA FÍSICA

Universidade NOVA de Lisboa  
Setembro, 2024





# ESPECTROMETRIA DE RADIAÇÃO X PARA METROLOGIA EM PROTEÇÃO RADIOLÓGICA

**JOÃO CARLOS PACHECO NUNES**

Licenciatura em Engenharia Física

**Orientador:** Doutor Andreas Kling

*Investigador Auxiliar, Instituto Superior Técnico*

**Coorientador:** Doutor João Duarte Neves Cruz

*Professor Associado, Universidade Nova de Lisboa*

## Júri

**Presidente:** Doutor Paulo António Martins Ferreira Ribeiro

*Professor Associado, FCT-NOVA*

**Arguente:** Doutora Margarida Isabel Camacho Caldeira

*Técnica Superior, CTN-IST*

**Vogal:** Doutor Andreas Kling

*Investigador Auxiliar, CTN-IST*



## **Espetrometria de Radiação X para Metrologia em Proteção Radiológica**

Copyright © João Carlos Pacheco Nunes, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade NOVA de Lisboa.

A Faculdade de Ciências e Tecnologia e a Universidade NOVA de Lisboa têm o direito, perpétuo e sem limites geográficos, de arquivar e publicar esta dissertação através de exemplares impressos reproduzidos em papel ou de forma digital, ou por qualquer outro meio conhecido ou que venha a ser inventado, e de a divulgar através de repositórios científicos e de admitir a sua cópia e distribuição com objetivos educacionais ou de investigação, não comerciais, desde que seja dado crédito ao autor e editor.



Pais. Eu consegui.



## AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, gostaria de expressar a minha mais profunda gratidão ao meu orientador, Investigador Andreas Kling, cujo apoio constante, paciência e imensa sabedoria tornaram este trabalho possível. O seu suporte incondicional, mesmo nos momentos em que tudo parecia perdido, foi fundamental para que eu conseguisse chegar até aqui. Não poderia estar mais feliz por ter sido o Andreas a pessoa que me guiou durante estes últimos e desafiantes meses, repletos de adversidades. Um simples "obrigado" não é suficiente para expressar toda a minha gratidão por tudo o que fez por mim. Guardarei esta experiência e a sua ajuda com carinho para o resto da minha vida.

Gostaria também de agradecer à Investigadora Ana Fernandes, cujo apoio imenso foi um pilar ao longo de todo o meu trabalho, mesmo não sendo eu seu orientando. Obrigado por todos os almoços, pelos conselhos sábios e pelas palavras de encorajamento, que me ajudaram a acreditar nas minhas capacidades.

Ao meu co-orientador, Professor João Cruz, o meu sincero obrigado por ter proporcionado a ligação entre mim e o meu orientador. Sem si, eu não teria conhecido as pessoas incríveis que conheci no CTN, e sou imensamente grato por isso.

Agradeço também ao meu amigo e colega de curso, Diogo Neves, pela paciência inesgotável em me ajudar nos momentos em que mais precisei. Obrigado por me ouvires e ofereceres sempre uma palavra amiga quando precisei de desabafar. Sou muito grato por te ter ao meu lado, meu grande amigo Nivean.

Aos meus pais, minha irmã, meus avós, meus tios, minha prima, o meu mais profundo obrigado por todo o apoio e amor durante todas as fases da minha vida. Obrigado por sempre acreditarem em mim e me darem a força necessária para continuar mesmo nos momentos mais difíceis da minha vida. Obrigado por me ouvirem a queixar que estava constantemente cheio de trabalho. Obrigado pai por sempre acreditares em mim e por me ouvires às tantas da noite, após chegares exausto do trabalho, a divagar sobre os meus problemas. Obrigado mãe por seres um dos grandes pilares da minha vida, se não o maior. Espero poder retribuir no futuro tudo aquilo que fizeste e fazes por mim. Obrigado irmã por todas as gargalhadas e momentos de palhaçada que me proporcionas.

Gostava de agradecer também aos meus grandes amigos, André, Gonçalo e Filipa

por serem os melhores amigos do mundo. Obrigado por todos os momentos, todas as gargalhadas, todos os planos em cima do joelho e acima de tudo, por estarem lá para mim, tanto nos bons momentos, quanto nos maus.

Por fim, gostava de agradecer a uma das pessoas que mais amo nesta vida, Diana, por seres a melhor amiga que eu alguma vez podia pedir. Contigo não há um momento em que não esteja de sorriso na cara, mesmo estando a passar maus momentos na minha vida. Obrigado por fazeres parte da minha vida Diana.

## RESUMO

Os monitores de área e dosímetros individuais medem as grandezas operacionais no contexto da proteção radiológica. Estes dosímetros devem ser calibrados e verificados regularmente em feixes de radiação caracterizados em termos das grandezas operacionais. O método mais comum para caracterizar os feixes de radiação baseia-se na medição do kerma no ar e aplicação de fatores de conversão para obter as grandezas operacionais. No caso de feixes de radiação X, a norma ISO 4037:2019 contém valores tabelados para os fatores de conversão em condições (qualidades de radiação e distâncias em relação à fonte) bem definidas, e refere a possibilidade de determinar os fatores de conversão com base na distribuição energética dos fotões. Este trabalho consistiu na aplicação, para efeitos de espectrometria de radiação X, de um detetor de Telureto de Cádmio com funções de resposta calculadas por simulação Monte Carlo integrando os efeitos resultantes da resolução e de processos físicos que distorcem o espectro. O detetor foi utilizado para medir, pela primeira vez, os espectros de radiação X disponíveis no Laboratório de Metrologia das Radiações Ionizantes (LMRI) do IST para calibração dos equipamentos de proteção radiológica.

**Palavras-chave:** monitores de área, proteção radiológica, espectrometria de radiação X, funções de resposta, calibração de equipamentos



## ABSTRACT

Area monitors and individual dosimeters measure operational quantities in the context of radiological protection. These dosimeters must be regularly calibrated and verified in radiation beams characterized in terms of operational quantities. The most common method to characterize radiation beams is based on the measurement of air kerma and the application of conversion factors to obtain operational quantities. In the case of X-ray radiation beams, ISO 4037:2019 contains tabulated values for conversion factors under well-defined conditions (radiation qualities and distances from the source) and mentions the possibility of determining conversion factors based on the photon energy distribution. This work involved the application, for X-ray spectrometry purposes, of a Cadmium Telluride detector with response functions calculated through Monte Carlo simulation, incorporating the effects of resolution and physical processes that distort the spectrum. The detector was used for the first time to measure the X-ray spectra available at the Ionizing Radiation Metrology Laboratory (LMRI) of IST, for the calibration of radiological protection equipment.

**Keywords:** area monitors, radiological protection, X-ray spectrometry, response functions, calibration of equipment



# ÍNDICE

|   |             |
|---|-------------|
| <b>Índice de Figuras</b>  | <b>xiii</b> |
| <b>Índice de Tabelas</b>  | <b>xv</b>   |
| <b>Siglas</b>   | <b>xvii</b> |
| <b>1 Introdução</b>   | <b>1</b>    |
| 1.1 Proteção Radiológica e Grandezas Operacionais . . . . .             | 1           |
| 1.2 Laboratório de Metrologia de Radiações Ionizantes (LMRI) . . . . .  | 1           |
| 1.3 Motivação e Objetivo . . . . .                                      | 2           |
| <b>2 Conceitos Teóricos</b>   | <b>3</b>    |
| 2.1 Produção de Raios-X . . . . .                                       | 3           |
| 2.1.1 Efeito Bremsstrahlung . . . . .                                   | 4           |
| 2.1.2 Emissão de raios X característicos . . . . .                      | 4           |
| 2.2 O que é um espectro? . . . . .                                      | 5           |
| 2.3 Detetores semicondutores de radiação X . . . . .                    | 5           |
| 2.3.1 Como são detectados os fótons que embatem num detector? . . . . . | 5           |
| 2.3.2 Detetores de maior relevância . . . . .                           | 5           |
| 2.4 Detetores de CdTe . . . . .   | 6           |
| 2.4.1 Efeito de <i>Carrier Trapping Effect</i> . . . . .                | 7           |
| 2.4.2 Picos de escape . . . . .   | 8           |
| 2.4.3 <i>Efeito de Incomplete Charge Collection</i> . . . . .           | 8           |
| 2.4.4 Resolução do Detetor . . . . .                                    | 9           |
| 2.4.5 Modelo analítico . . . . .  | 10          |
| <b>3 Estado da Arte</b>   | <b>11</b>   |
| 3.1 Qualidades de radiação de referência . . . . .                      | 11          |
| 3.2 Simulação da resposta de um detetor . . . . .                       | 11          |
| 3.3 Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) . . . . .      | 13          |

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| 3.4      | Desconvolução do espectro . . . . .                                       | 14        |
| <b>4</b> | <b>Materiais e Procedimentos</b>  | <b>15</b> |
| 4.1      | Detetor XR-100T CdTe (AMPTEK, Inc., U.S.A) . . . . .                      | 15        |
| 4.2      | Simulação do detetor . . . . .  | 16        |
| 4.3      | Calibração do detetor para aquisição de espectros experimentais . . . . . | 17        |
| 4.3.1    | Configurações . . . . .   | 17        |
| 4.3.2    | Reta de calibração do detetor . . . . .                                   | 17        |
| 4.4      | Determinação da resolução do detetor . . . . .                            | 17        |
| 4.5      | Simulação dos efeitos de Charge Trapping e resolução no detetor . . . . . | 19        |
| 4.5.1    | Extração de dados do PHITS . . . . .                                      | 19        |
| 4.5.2    | Simulação do modelo CCT . . . . .   | 19        |
| 4.5.3    | Simulação da resolução do detetor . . . . .                               | 21        |
| 4.6      | Simulação do colimador a ser utilizado no detetor . . . . .               | 22        |
| 4.7      | Obtenção da matriz de resposta do detetor . . . . .                       | 24        |
| 4.8      | Aquisição do espectro de raios X . . . . .                                | 26        |
| 4.8.1    | Alinhamento do feixe de raios X . . . . .                                 | 27        |
| 4.8.2    | Determinação do tamanho de campo . . . . .                                | 28        |
| 4.8.3    | Aparato experimental final . . . . .                                      | 28        |
| 4.8.4    | Irradiação do detetor . . . . .   | 30        |
| <b>5</b> | <b>Resultados e Discussão</b>   | <b>33</b> |
| 5.1      | Desconvolução . . . . .   | 33        |
| <b>6</b> | <b>Conclusão</b>  | <b>37</b> |
|          | <b>Bibliografia</b>   | <b>39</b> |

## ÍNDICE DE FIGURAS

|      |  |    |
|------|--|----|
| 2.1  | Produção de Raios-X. Retirado de [12] . . . . .  | 3  |
| 2.2  | Emissão de raios X característicos. Retirado de [12] . . . . .   | 5  |
| 2.3  | Espectro Experimental de Fonte Selada de Am-241 . . . . .  | 7  |
| 2.4  | Esquema ilustrativo do efeito CTE. Retirado de [16]. . . . .   | 8  |
| 2.5  | Gráfico de eficiência do detetor XR-100T CdTe AMPTEK. Retirado de [19] . . . . .   | 9  |
| 3.1  | Espectro de fluência para uma voltagem geradora de 30 kV com aumentos de filtração. Retirado de [9] . . . . .  | 12 |
| 4.1  | Detetor XR-100T CdTe . . . . .   | 15 |
| 4.2  | Secção transversal do detetor XR-100T CdTe, sem colimador. Simulado no PHITS. . . . .  | 16 |
| 4.3  | Gráfico de FWHM em função da energia com o ajuste feito. . . . .   | 18 |
| 4.4  | Secção do userdefined extraído do PHITS. . . . .   | 20 |
| 4.5  | Espectro Am-241 apenas com contribuições discretas. . . . .  | 20 |
| 4.6  | Espectro Am-241 com a aplicação do CTE e do ICC. Em cima — Espectro completo. Em baixo — Pico de 59.54 keV ampliado. . . . .   | 22 |
| 4.7  | Espectro Am-241 com a aplicação da resolução. Em cima — Espectro completo. Em baixo — Pico de 59.54 keV ampliado. . . . .  | 23 |
| 4.8  | Corpo do colimador, colimador de latão, disco de tungstênio de 400 $\mu\text{m}$ e espaçadores de aço inox. . . . .  | 24 |
| 4.9  | Secção transversal do detetor XR-100T CdTe, com a adição do colimador. Simulado no PHITS. . . . .  | 25 |
| 4.10 | Gráficos de funções de resposta do detetor. . . . .  | 26 |
| 4.11 | Matriz de resposta do detetor . . . . .  | 26 |
| 4.12 | Aparato experimental para alinhamento do feixe de raios X . . . . .  | 28 |
| 4.13 | Determinação do tamanho do campo de raios X que atingem o detetor. Esquerda — Aparecimento do campo na película radiográfica. Direita — Gráfico de transmissão relativa em função de distância em pixels para determinação do tamanho de campo . . . . . | 29 |

|      |   |    |
|------|---|----|
| 4.14 | Aparato experimental final para aquisição do espectro de raios X . . . . .                      | 29 |
| 4.15 | Distância do detetor à posição do alvo anteriormente utilizado . . . . .                        | 30 |
| 4.16 | Controlo dos parâmetros de produção de raios X e espectro de raios X experi-<br>mental. . . . . | 31 |
| 4.17 | Espetros de raios X experimentais das séries N-60, N-80, N-100. . . . .                         | 31 |
| 5.1  | Nova matriz de resposta com intervalos de 0.5 keV obtida por interpolação.                      | 34 |
| 5.2  | Exemplos de nove espectros de desconvolução. . . . .  | 35 |
| 5.3  | Média dos nove espectros de desconvolução comparado com o espectro SpekPy.                      | 35 |

## ÍNDICE DE TABELAS

|     |   |    |
|-----|---|----|
| 2.1 | Propriedades do Ge, Si e CdTe. Retirado de [13] . . . . .   | 6  |
| 3.1 | Características da <i>narrow-spectrum séries</i> (Série-N). Adaptado de [9] . . . . .   | 12 |
| 3.2 | Lista de códigos MC mais utilizados em rastreamento de partículas . . . . .   | 13 |
| 4.1 | Radionuclídeos, seu canal, energia correspondente e FWHM. Valores de energia retirados de [26, 27]. . . . .   | 18 |
| 4.2 | Parâmetros utilizados para simular o CTE e o ICC . . . . .  | 21 |
| 4.3 | Incrementos de energia das funções de resposta do detetor. . . . .  | 24 |
| 4.4 | Energias dos picos pronunciados que ocorrem nas funções de resposta. $E_{\gamma 0}$ é a energia dos picos resultantes. $E_{\gamma}$ é a energia dos fótons primários. Adaptado de [24]. . . . . | 27 |



## SIGLAS

|                 |  |
|-----------------|--|
| <b>AIEA/OMS</b> | Agência Internacional de Energia Atômica e da Organização Mundial de Saúde ( <i>p. 1</i> ) |
| <b>CCE</b>      | Charge Collection Efficiency ( <i>p. 8</i> )   |
| <b>CCP</b>      | Carrier Collection Probability ( <i>p. 8</i> )   |
| <b>CCT</b>      | Charge Carrier Transport ( <i>pp. 10, 19, 25</i> )   |
| <b>CdTe</b>     | Telureto de Cádmio ( <i>pp. 5–10, 15, 17, 19, 24–26, 37, 38</i> )                          |
| <b>CTE</b>      | Carrier Trapping Effect ( <i>pp. 7, 8, 10, 21</i> )  |
| <b>CTN</b>      | Campus Tecnológico Nuclear ( <i>pp. 1, 13, 15</i> )  |
| <b>HPGe</b>     | Germânio hiper-puro ( <i>pp. 5, 6</i> )  |
| <b>HVL</b>      | Half Value Layer ( <i>p. 27</i> )  |
| <b>ICC</b>      | Incomplete Charge Collection ( <i>pp. 8–10, 21</i> )                                       |
| <b>ICRU</b>     | Comissão Internacional de Unidades e Medidas de Radiação ( <i>p. 1</i> )                   |
| <b>IPQ</b>      | Instituto Português da Qualidade ( <i>p. 1</i> )   |
| <b>IST</b>      | Instituto Superior Técnico ( <i>p. 1</i> )   |
| <b>LMRI</b>     | Laboratório de Metrologia de Radiações Ionizantes ( <i>pp. 1, 2, 11, 15, 22, 27</i> )      |
| <b>LPSR</b>     | Laboratório de Proteção e Segurança Radiológica ( <i>p. 1</i> )                            |
| <b>MC</b>       | Monte Carlo ( <i>pp. 11, 12, 24</i> )  |
| <b>N</b>        | Narrow ( <i>pp. 11, 27, 28</i> )   |
| <b>PHITS</b>    | Particle and Heavy Ion Transport System ( <i>pp. 13, 16, 21, 33, 37</i> )                  |



# INTRODUÇÃO

## 1.1 Proteção Radiológica e Grandezas Operacionais

É de conhecimento comum que a exposição à radiação ionizante apresenta um risco para a saúde das pessoas expostas, p. ex. trabalhadores e membros do público. O objetivo da proteção radiológica é otimizar a exposição à radiação ionizante, por forma a obter os benefícios da aplicação da radiação com o mínimo de exposição [2]. O risco de ocorrência de efeitos estocásticos ou determinísticos é avaliado a partir das grandezas de proteção (Dose Efetiva e Dose Equivalente) para as quais estão estabelecidos limites de exposição [3]. Como estas grandezas não são mensuráveis, definem-se as grandezas operacionais [4] que permitem monitorizar os níveis de exposição dos trabalhadores expostos e membros do público, garantindo o cumprimento dos limites legais. As grandezas operacionais, usadas na monitorização de área (Equivalente de Dose Ambiente e Equivalentes de Dose Direcional) e individual (Equivalentes de Dose Individual), são indiretamente mensuráveis porque correspondem à conversão de uma grandeza física (Kerma no ar, no caso de caso de radiação X) através da aplicação de fatores de conversão. Estes são definidos pela Comissão Internacional de Unidades e Medidas de Radiação (ICRU) e encontram-se no Report 95 desta organização [4].

## 1.2 Laboratório de Metrologia de Radiações Ionizantes (LMRI)

O Laboratório de Metrologia de Radiações Ionizantes (LMRI) é integrante do Laboratório de Proteção e Segurança Radiológica (LPSR) do Instituto Superior Técnico (IST), situado no Campus Tecnológico Nuclear (CTN), onde são desenvolvidas atividades tais como, metrologia das radiações ionizantes, dosimetria individual e ambiental, e dosimetria biológica [5]. O LMRI é reconhecido pelo Instituto Português da Qualidade (IPQ) como Instituto designado para a área das radiações ionizantes, assim como Organismo de Verificação Metrológica de instrumentos de medição de radiações ionizantes [6, 7]. O LMRI integra a rede de laboratórios secundários de dosimetria da Agência Internacional de Energia Atómica e da Organização Mundial de Saúde (AIEA/OMS) [5, 8].

O LMRI dispõe de diversos feixes de radiação para realizar a calibração e verificação de equipamentos de proteção radiológica tais como, feixes de Cs-137, Co-60 e ainda feixes de raios X da série *narrow*, que observam as características e métodos de produção definidas pela norma ISO 4037 [9].

### 1.3 Motivação e Objetivo

Os feixes de radiação do LMRI encontram-se caracterizados em termos da grandeza física kerma no ar, que é convertida nas grandezas operacionais por aplicação dos fatores de conversão tabelados como explicado em 1.1.

A utilização de fatores de conversão tabelados apresenta limitações uma vez que, estes só são válidos para determinadas qualidades de radiação e distâncias à fonte de radiação ionizante. Para outras qualidades de radiação e distâncias, é necessário determinar a distribuição de energia dos fótons e calcular os fatores de conversão, através de interpolação dos valores recomendados para fótons de energia bem definida (monoenergéticos). Assim, é necessário que o LMRI tenha os meios para efetuar medidas da distribuição de energia dos fótons de radiação X [10].

Este projeto, tem então como objetivo, participar e contribuir ativamente para a implementação da espectrometria de radiação X no LMRI.<sup>1</sup>

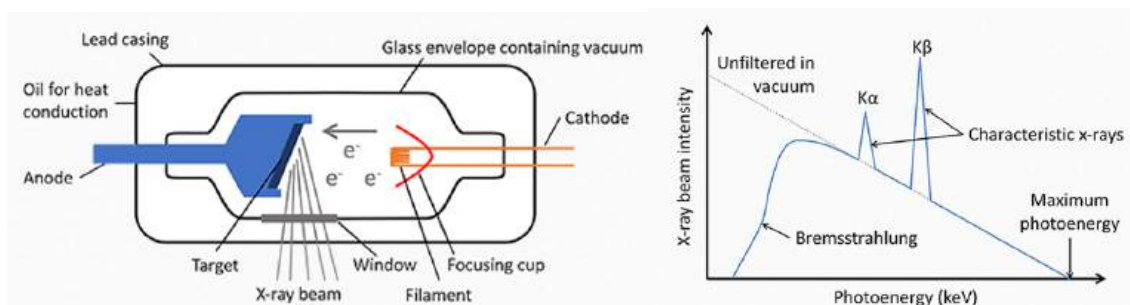
---

<sup>1</sup>O trabalho de investigação descrito nesta dissertação foi realizado de acordo com as normas estabelecidas no código de ética da Universidade Nova de Lisboa. O trabalho descrito e o material apresentado nesta dissertação, com as exceções claramente indicadas, constituem trabalho original realizado pelo autor.

## CONCEITOS TEÓRICOS

### 2.1 Produção de Raios-X

Como é amplamente sabido, a radiação X é gerada por meio de um tubo de raios X. Estes tubos contêm um filamento no seu interior, onde se aplica uma pequena diferença de potencial inicial. Esta diferença de potencial provoca um aumento da corrente que percorre o filamento, resultando no seu aquecimento. O aquecimento do filamento leva à emissão de elétrons através de um processo físico conhecido como efeito termiônico. Esses elétrons são então acelerados por uma segunda diferença de potencial, geralmente entre 30 e 150 kV, do cátodo em direção a um alvo, tipicamente de tungstênio, localizado no ânodo. A interação dos elétrons altamente energéticos com o núcleo dos átomos de tungstênio pode resultar na remoção de um elétron das camadas mais internas, gerando uma lacuna. Essa lacuna é preenchida pela transição de um elétron de uma camada superior para uma inferior, resultando na emissão de raios X característicos. No entanto, são também emitidos raios X através do efeito de Bremsstrahlung, sendo estes a contribuição dominante no espectro de raios X observado. É possível observar na figura 2.1 o tubo de raios X bem como, o espectro esperado com a presença dos raios X característicos e efeito de Bremsstrahlung [11].



(a) Diagrama de um tubo de Raios-X

(b) espectro de Raios X

Figura 2.1: Produção de Raios-X. Retirado de [12]

### 2.1.1 Efeito Bremsstrahlung

Como foi mencionado em 2.1, o efeito de Bremsstrahlung é a contribuição mais dominante de um espectro de raios X onde, cerca de 80% dos fótons emitidos, são devido a este efeito [12]. Este efeito resulta da desaceleração abrupta dos elétrons que foram emitidos. Por outras palavras, os elétrons que foram previamente acelerados pelo campo elétrico, ao interagirem com o campo elétrico gerado pelo núcleo dos átomos constituintes do alvo, perdem parte, ou, a totalidade da sua energia, desviando-se do seu trajeto. Ora, pela lei da conservação de energia, a perda de velocidade do elétron faz com que, essa energia cinética que foi perdida, seja re-emitada sob forma de um fóton, sendo este fóton, um fóton de Bremsstrahlung. É raro o elétron perder a totalidade da sua energia, mas, quando isso ocorre, estamos na presença da energia máxima possível emitida pelo tubo de raios X, como é possível observar na figura 2.1(b) [11, 12].

A energia emitida num espectro através do efeito de Bremsstrahlung, varia de 0 keV, até à energia definida pela diferença de potencial do tubo de raios X, em kV. É favorável utilizar um material de alto número atómico como alvo, ou seja, um núcleo que tenha um maior poder de paragem, de forma a otimizar a eficiência dos raios X emitidos por Bremsstrahlung, uma vez que, quanto maior o número atómico, mais forte será o campo eletromagnético em torno do núcleo e maior será a probabilidade de interação entre os elétrons e o núcleo. Para além disso, é importante que o alvo possua um alto ponto de fusão, dado que, durante o processo de gerar raios X, apenas uma pequena fração da energia dos elétrons é convertida em raios X, e o restante é convertido em calor. É vital que o alvo seja capaz de suportar estas altas temperaturas sem se fundir ou danificar. O facto do tungsténio possuir um número atómico alto, 74, e um ponto de fusão também alto, cerca de 3695 K, faz com que este seja um dos elementos mais comuns como alvo para produção de raios X [11].

### 2.1.2 Emissão de raios X característicos

A emissão de raios X característicos é, nada mais nada menos que, a energia libertada quando um elétron transita de uma camada com energia de ligação menor, para uma com energia de ligação maior, ou, de outra forma, de uma camada de energia maior para uma de energia menor. Esta energia é inteiramente dependente do material constituinte do alvo.

O elétron que foi previamente acelerado pelo campo elétrico, embate no alvo, fazendo com que seja ejetado um elétron da camada-K (*K-shell*) (ou qualquer outra camada). Esta é a camada mais interna de um átomo. Ao criar a lacuna na camada-K, outro elétron de uma camada superior, move-se de forma a ocupar essa lacuna criada. Esta transição de um nível de energia superior, para um nível de energia inferior, resulta na libertação de energia sob forma de fótons raios X. O processo descrito está representado na figura 2.2.

Quando a transição do elétron efetua-se de uma camada L para uma camada K, estamos na presença de uma transição chamada de  $K_{\alpha}$ . Quando a transição é feita de uma camada

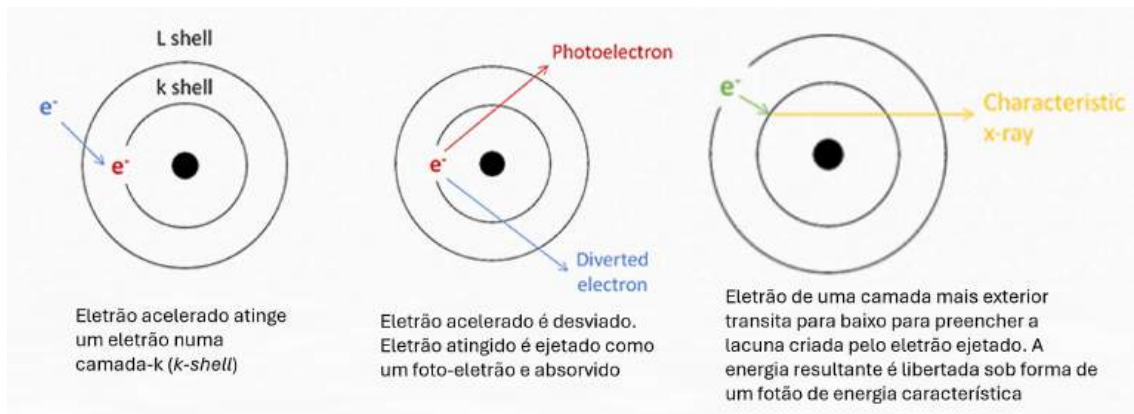


Figura 2.2: Emissão de raios X característicos. Retirado de [12]

M para uma K, temos uma transição  $K_\beta$  e assim sucessivamente.

## 2.2 O que é um espectro?

Um espectro é a distribuição de probabilidades de uma grandeza física p. e.x. energia. No caso dum detetor de radiação, trata-se da distribuição de pulsos elétricos gerados por um detetor, onde os dados são organizados em pequenos intervalos de voltagem, chamados de canais. Esses canais agrupam os sinais de saída do detetor com base na sua amplitude, e, após a devida calibração, são convertidos em valores de energia. Essa conversão permite a análise precisa da radiação incidente, facilitando a identificação das suas características energéticas. [13].

## 2.3 Detetores semicondutores de radiação X

### 2.3.1 Como são detectados os fótons que embatem num detetor?

Quando um fóton incide na célula do detetor, ocorre a interação que resulta na formação de pares elétron-lacuna no meio ativo. As cargas geradas são recolhidas pelos elétrodos devido à ação de uma diferença de potencial aplicada na região e são enviadas para um pré-amplificador, cuja função é converter a corrente elétrica em picos de tensão. Em seguida, o sinal obtido é amplificado por um amplificador, que gera um pulso elétrico. Este pulso é posteriormente classificado por amplitude num analisador multicanal

### 2.3.2 Detetores de maior relevância

Os dois detetores mais importantes para radiação X são os detetores semicondutores de Germânio hiper-puro (HPGe) e de Telureto de Cádmio (CdTe) [13].

Os detetores de HPGe possuem uma elevada resolução em energia, devido ao seu reduzido hiato de energia, e podem apresentar dimensões consideráveis. No entanto, são

dispositivos caros e exigem operação a baixas temperaturas, sendo tipicamente arrefecidos com azoto líquido. Esta necessidade acarreta custos operacionais elevados e limita a transportabilidade do sistema de deteção. O facto de o Germânio possuir um hiato de energia pequeno facilita a transição dos eletrões para a banda de condução, mesmo sob a influência do ruído térmico gerado pelas interações no meio, o que pode resultar na produção de uma corrente ruidosa, prejudicando a eficiência da deteção.

Os detetores de CdTe possuem um número atómico efetivo elevado, o que lhes confere uma eficiência de deteção superior. Isto deve-se ao facto de que, quanto maior for o número atómico efetivo, maior é a probabilidade de um fóton ser absorvido através do efeito fotoelétrico. A dependência da secção eficaz do efeito fotoelétrico em relação ao número atómico é descrita pela equação 2.1, onde  $n$  é um número que se situa entre 4 e 5 [14].

$$\sigma \propto \frac{Z^n}{E_\gamma^{3.5}} \quad (2.1)$$

Esta característica permite a utilização de cristais mais pequenos e de menor custo, embora possa ser necessário o uso de colimadores para evitar a saturação do detetor [10]. A resolução em energia, no entanto, é inferior à dos detetores de HPGe, devido ao maior número de defeitos cristalinos. Contudo, o hiato de energia superior ao do HPGe elimina a necessidade de arrefecimento, o que simplifica a sua utilização. Este será o tipo de detetor utilizado na realização deste trabalho.

Tabela 2.1: Propriedades do Ge, Si e CdTe. Retirado de [13]

| Materials | Conduction Bandgap (eV) | Electron Mobility (cm <sup>2</sup> /V×s) | Hole Mobility (cm <sup>2</sup> /V×s) |
|-----------|-------------------------|--|--------------------------------------|
| Ge        | 0.67                    | $3.6 \times 10^4$                        | $4.2 \times 10^4$                    |
| Si        | 1.106                   | 1350                                     | 480                                  |
| CdTe      | 1.47                    | $1.0 \times 10^3$                        | 80                                   |

Na tabela 2.1 são apresentadas as propriedades dos materiais anteriormente mencionados, em particular os hiatos de energia de ambos (*Conduction Bandgap*), o que justifica a necessidade ou não de arrefecimento. Também é possível observar a mobilidade dos pares eletrão-lacuna, a qual afeta a resolução do detetor devido aos defeitos na estrutura cristalina, que comprometem o transporte de carga. O germânio, por ser um material homogéneo e de elevada pureza, proporciona uma mobilidade eletrão-lacuna superior em comparação com materiais como o silício ou o CdTe.

## 2.4 Detetores de CdTe

Como mencionado na secção 2.3, o detetor a ser utilizado neste trabalho será o de CdTe. No entanto, este tipo de detetor apresenta um problema adicional que deve ser considerado. O cristal CdTe está sujeito a um fenómeno denominado *Incomplete Charge Collection*, ou em português, Colheita de Carga Ineficiente. Este fenómeno é mais pronunciado em

altas energias, acima de 50 keV [10], quando o fóton incidente penetra em zonas mais profundas do detector. Esse aumento na profundidade faz com que o tempo necessário para a coleta das lacunas aumente, tornando mais fácil o aprisionamento dessas cargas devido à sua baixa mobilidade (*Hole Mobility*), como ilustrado na tabela 2.1. Consequentemente, e devido ao fato de que o sinal é uma combinação da coleta de elétrons e lacunas, pode-se observar uma coleta ineficiente da energia do fóton incidente, resultando em um efeito de "cauda" no pico do espectro [13]. O efeito mencionado pode ser observado na figura 2.3, especificamente no foto-pico de 59.54 keV do Am-241.

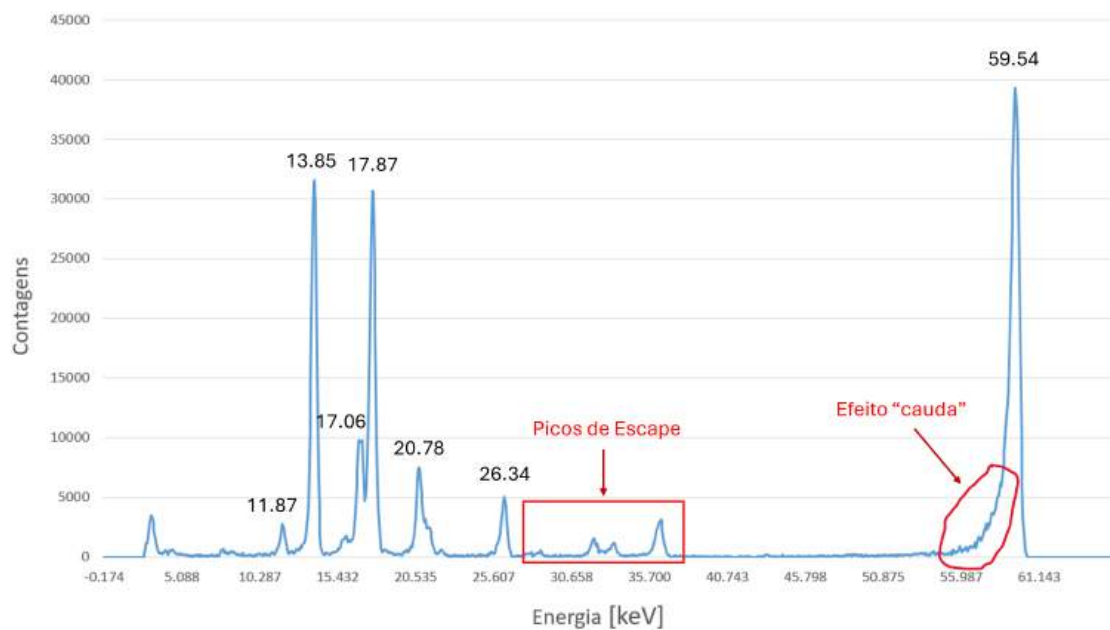


Figura 2.3: Espectro Experimental de Fonte Selada de Am-241

### 2.4.1 Efeito de *Carrier Trapping Effect*

*Carrier Trapping Effect (CTE)* é o fenômeno pelo qual grande parte da carga induzida no sensor de CdTe é perdida devido à interação da radiação ionizante ao longo do cristal de CdTe com os elétrodos, devido à elevada densidade de *trapping sites* ou, em português, zonas de aprisionamento [15]. Quando a radiação interage com o detector, os elétrons e lacunas gerados movem-se em direção aos elétrodos. Contudo, a presença dos *trapping sites* pode levar ao aprisionamento de algumas dessas cargas, o que reduz o campo elétrico interno sentido pelos transportadores de carga. Esta redução no campo elétrico diminui a velocidade dos transportadores, o que pode resultar no aprisionamento adicional de outros transportadores. Como consequência, ocorre uma deformação dos foto-picos, conforme descrito na secção 2.4. A figura 2.4 apresenta um esquema ilustrativo desse fenômeno.

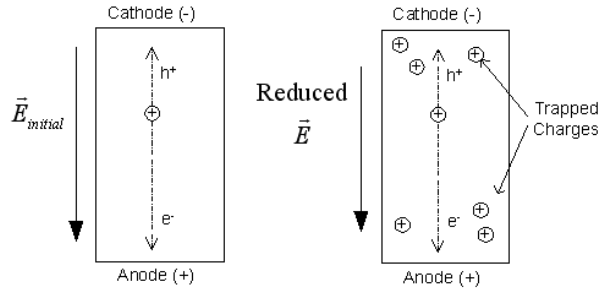


Figura 2.4: Esquema ilustrativo do efeito CTE. Retirado de [16].

A quantidade relativa de carga acumulada pode ser expressa como a *Charge Collection Efficiency (CCE)*, descrita pela equação de Hecht modificada (Equação 2.2) [10, 17].

$$CCE(z) = \frac{K_e}{d} \left[ \lambda_h \left( 1 - e^{-\frac{z}{\lambda_h}} \right) + \lambda_e \left( 1 - e^{-\frac{d-z}{\lambda_e}} \right) \right], K_e = \frac{\frac{d}{\lambda_e}}{1 - e^{-\frac{d}{\lambda_e}}} \quad (2.2)$$

onde  $d$  é a espessura do sensor de CdTe,  $\lambda_h$  é o livre percurso médio das lacunas,  $\lambda_e$  é o livre percurso médio dos elétrons,  $z$  é a profundidade de criação de transportadores de carga no sensor de CdTe, e o  $K_e$  é uma constante de "pré-calibração". Este  $K_e$  serve para manter o  $CCE = 1$  para  $z = 0$  cm, o que faz com que não haja alteração da posição do foto-pico.

O CTE é mais predominante para foto-picos de energia elevada.

## 2.4.2 Picos de escape

Na região destacada pelo retângulo vermelho da figura 2.3, são visíveis picos cuja origem não é imediatamente clara a partir de uma análise preliminar. Esses picos correspondem aos picos de escape do detector de CdTe, sendo atribuídos às linhas  $K_\beta$  e  $K_\alpha$  do Cd, com energias de 23.3 keV e 26.1 keV, respectivamente, e às linhas  $K_\beta$  e  $K_\alpha$  do Te, com energias de 27.5 keV e 31.0 keV [18]. Esses picos surgem quando a energia dos fótons incidentes é superior à energia necessária para remover elétrons, por exemplo, da camada K. Quando isso ocorre, são emitidos fótons característicos com as energias mencionadas. Se essas energias não forem completamente absorvidas pelo detector, a energia resultante,  $E = E_{inc} - E_{K_\alpha}$ , onde  $E_{inc}$  é a energia do fóton incidente e  $E_{K_\alpha}$  a energia da risca  $K_\alpha$ , é depositada no detector resultando no aparecimento dos picos de escape.

## 2.4.3 Efeito de Incomplete Charge Collection

A *Incomplete Charge Collection (ICC)* tem em conta o sinal medido originado na "dead layer" junto à superfície do detector, imediatamente debaixo dos elétrodos, nos quais, a coleção de carga será incompleta, em vez de zero. O ICC é descrito pela função Carrier Collection Probability (CCP), descrita pela equação 2.3 [10]:

$$CCP = 1 - (1 - RC) e^{-z \frac{V_s}{D}} \quad (2.3)$$

onde  $RC$  é a refletividade,  $D$  é o coeficiente de difusão efetiva,  $v_s$  é a velocidade de saturação e  $z$  é a profundidade de criação de transportadores de carga no sensor de CdTe.

O ICC afeta predominantemente o formato dos foto-picos de menor energia.

#### 2.4.4 Resolução do Detetor

Todos os detetores possuem uma resolução em energia específica, que se manifesta como um alargamento do foto-pico devido ao ruído de Fano e ao ruído eletrônico. Não será abordado em detalhe o funcionamento desses ruídos, pois está fora do âmbito deste trabalho.

A resolução ( $\sigma$ ) é descrita pela largura a meia altura, ou *Full-Width-at-Half-Maximum* (FWHM) dos picos, que apresentam uma distribuição do tipo Gaussiana. É importante destacar que a resolução tende a aumentar significativamente com o aumento da energia, em função dos efeitos descritos nas seções anteriores. O que pode também afetar a resolução do detetor, é a sua eficiência, que começa a decrescer exponencialmente, a partir dos 70 keV, para o detetor de CdTe da AMPTEK, XR-100T, que será o detetor a ser utilizado ao longo deste trabalho. Isto pode acontecer, porque, se existem menos eventos a serem detetados a partir dos 70 keV, a qualidade do espectro pode diminuir devido à coleta incompleta de informação. É possível observar na figura 2.5 o efeito descrito anteriormente [17, 19].

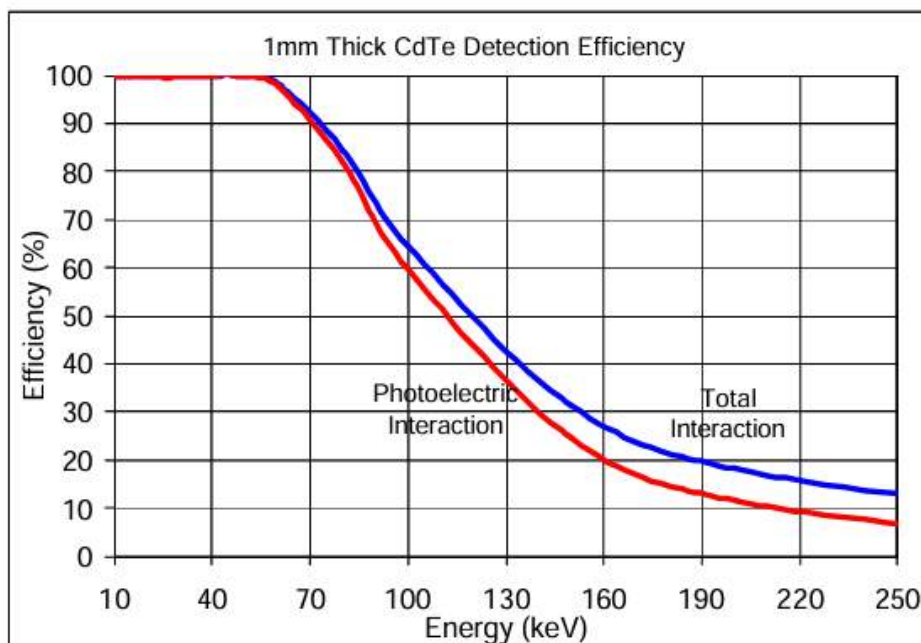


Figura 2.5: Gráfico de eficiência do detetor XR-100T CdTe AMPTEK. Retirado de [19]

### 2.4.5 Modelo analítico

Com toda a informação contida nas secções 2.4.1, 2.4.3 e 2.4.4 é possível fazer um modelo analítico capaz de simular as interações que ocorrem no detetor e consequentemente simular corretamente a resposta deste.

Em primeiro lugar, é necessário calcular os efeitos do CTE e do ICC na energia inicial dos foto-picos,  $E_i$ . Estes dois efeitos formam o que é chamado de modelo Charge Carrier Transport (CCT). Esta nova energia,  $E_{CCT}$ , é calculada então, através da equação (2.4).

$$E_{CCT} = CTE \cdot ICC \cdot E_i \quad (2.4)$$

De forma a obter a energia final ou rectificada,  $E_{rec}$ , depositada no detetor de CdTe, é necessário ainda aplicar os efeitos da resolução do detetor à energia calculada anteriormente. Esta alteração é realizada com recurso à equação (2.5).

$$E_{rec} = E_{CCT} + b \cdot \sigma(E_{CCT}) \quad (2.5)$$

Onde  $b$  é apenas um número aleatório resultante da distribuição normal com o desvio padrão,  $\sigma(E_{CCT})$ , proveniente da FWHM dos picos de energia  $E_{CCT}$  [10].

### 3.1 Qualidades de radiação de referência

A norma ISO 4037-1 [9], define quatro séries de referência de radiação, criadas através da interposição de filtros ao feixe emitido pelo tubo de raios-X, sendo cada série caracterizada pela resolução do espectro. As condições para produzir cada campo de radiação estão definidas para um conjunto de potenciais elétricos entre 10 kV e 400 kV. As quatro séries são, por ordem crescente de filtração (logo, ordem crescente de energia média):

- (a) *high air kerma rate series: H-series;*
- (b) *wide spectrum series: W-series;*
- (c) *narrow-spectrum series: N-series;*
- (d) *low air kerma rate series: L-series.*

A figura 3.1 mostra os espectros de fluência de fótons das quatro séries utilizando um potencial elétrico de 30 kV. As diferenças das áreas debaixo das curvas são uma indicação da elevada variação dos valores de kerma no ar destas qualidades de radiação. O LMRI dispõe da série Narrow (N) caracterizada por uma distribuição energética relativamente estreita, particularmente adequada para medição da resposta de dosímetros de radiação em função da energia dos fótons, e que fornece débitos de kerma no ar consistentes com o intervalo de operação da generalidade dos dosímetros de proteção radiológica [8]. As especificações da série N estão dispostas na tabela 3.1.

### 3.2 Simulação da resposta de um detetor

De forma a simular o detetor e calcular a sua matriz de resposta, pode-se fazer uso de métodos matemáticos determinísticos ou estocásticos. Neste projecto serão utilizados métodos estocásticos sob forma de simulações Monte Carlo (MC). As simulações MC da resposta do detetor baseiam-se na determinação das histórias de um número elevado de fótons e da energia depositada ao longo de cada história. A história corresponde

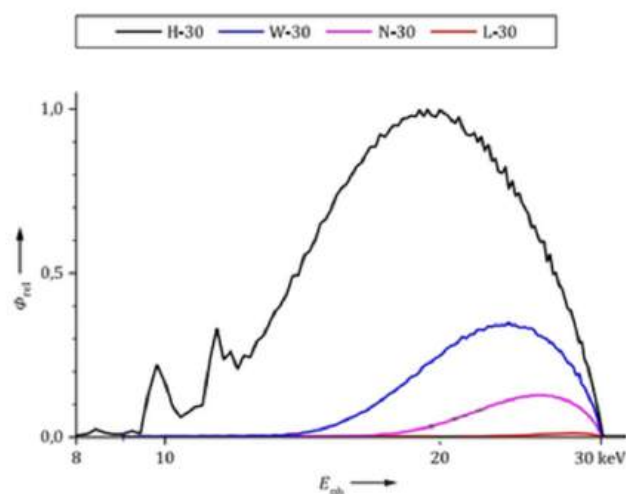


Figura 3.1: Espectro de fluência para uma voltagem geradora de 30 kV com aumentos de filtração. Retirado de [9]

Tabela 3.1: Características da *narrow-spectrum séries* (Série-N). Adaptado de [9]

| Short name | Mean energy $\bar{E}$ (keV) | Energy resolution $\Delta E/E$ (%) | Tube voltage U (kV) | Inherent filtration (mm Al) | Recommended additional filtration thickness, D, in (mm) | HVL at 1.0 m (mm) | HVL at 2.5 m (mm) |
|------------|-----------------------------|------------------------------------|---------------------|-----------------------------|---|-------------------|-------------------|
| N-10       | 8.5                         | 28                                 | 10                  | 1 mm Be                     | 0.1 mm Al   | 0.055 Al          | 0.065 Al          |
| N-15       | 12.4                        | 33                                 | 15                  | 1 mm Be                     | 0.5 mm Al   | 0.157 Al          | 0.173 Al          |
| N-20       | 16.3                        | 34                                 | 20                  | 1 mm Be                     | 1.0 mm Al   | 0.344 Al          | 0.362 Al          |
| N-25       | 20.3                        | 33                                 | 25                  | 1 mm Be                     | 2.0 mm Al   | 0.662 Al          | 0.677 Al          |
| N-30       | 24.6                        | 32                                 | 30                  | 1 mm Be                     | 4.0 mm Al   | 1.16 Al           | 1.17 Al           |
| N-40       | 33.3                        | 30                                 | 40                  | 4 mm Al                     | 0.21 mm Cu  | 2.63 Al           | 2.65 Al           |
| N-60       | 47.9                        | 36                                 | 60                  | 4 mm Al                     | 0.6 mm Cu   | 0.234 Cu          | 0.235 Cu          |
| N-80       | 65.2                        | 32                                 | 80                  | 4 mm Al                     | 2.0 mm Cu   | 0.578 Cu          | 0.580 Cu          |
| N-100      | 83.3                        | 28                                 | 100                 | 4 mm Al                     | 5.0 mm Cu   | 1.09 Cu           | 1.09 Cu           |
| N-120      | 100                         | 27                                 | 120                 | 4 mm Al                     | 1.0 mm Sn; 5.0 mm Cu                                    | 1.67 Cu           | 1.67 Cu           |
| N-150      | 118                         | 37                                 | 150                 | 4 mm Al                     | 2.5 mm Sn   | 2.30 Cu           | 2.30 Cu           |
| N-200      | 165                         | 30                                 | 200                 | 4 mm Al                     | 1.0 mm Pb; 3.0 mm Sn; 2.0 mm Cu                         | 3.92 Cu           | 3.91 Cu           |
| N-250      | 207                         | 28                                 | 250                 | 4 mm Al                     | 3.0 mm Pb; 2.0 mm Sn                                    | 5.10 Cu           | 5.08 Cu           |
| N-300      | 248                         | 27                                 | 300                 | 4 mm Al                     | 5.0 mm Pb; 3.0 mm Sn                                    | 5.96 Cu           | 5.94 Cu           |
| N-350      | 288                         | 29                                 | 350                 | 4 mm Al                     | 7.0 mm Pb; 4.5 mm Sn                                    | —                 | 6.69 Cu           |
| N-400      | 328                         | 27                                 | 400                 | 4 mm Al                     | 10.0 mm Pb; 6.0 mm Sn                                   | —                 | 7.31 Cu           |

à sequência aleatória das interações (efeito fotoelétrico, picos de escape, dispersão de Compton, etc.) entre o fóton e o material do detector, assim como dos elétrons resultantes das interações. Os fótons incidentes podem ter espectros discretos ou contínuos.

Existem vários tipos de código estocástico MC utilizados em espectrometria tais como, GEANT, FLUKA, EGS, PHITS, MCNP, PENELOPE, entre muitos outros. É possível observar na tabela 3.2, uma lista dos códigos MC mais utilizados para rastreamento de partículas.

Tabela 3.2: Lista de códigos MC mais utilizados em rastreamento de partículas

| Code name  | Particles handled            | Language |
|------------|------------------------------|----------|
| ETRAN/ITS  | Protons, Electrons           | Fortran  |
| PHITS      | All particles                | Fortran  |
| SHIELD-HIT | All particles                | Fortran  |
| MCNP       | Protons, Electrons, Neutrons | Fortran  |
| MCNPX      | All particles                | Fortran  |
| EGS        | Photons, Electrons           | Fortran  |
| PENELOPE   | Photons, Electrons           | Fortran  |
| GEANT3     | All particles                | Fortran  |
| GEANT4     | All particles                | C++      |
| FLUKA      | All particles                | Fortran  |
| PETRA      | Protons, Electrons, Neutrons | C++      |

Para a execução deste trabalho, será feito uso do Particle and Heavy Ion Transport System (PHITS), visto ser o software disponibilizado pelo CTN.

### 3.3 Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS)

Como referido em 3.2, será utilizado o PHITS. Uma das principais vantagens do PHITS está na capacidade de simular o transporte de partículas numa elevada gama de energias, desde eV até TeV, simulando todos os processos físicos conhecidos, tais como, dispersões elásticas e inelásticas, efeito fotoelétrico, interações eletromagnéticas, reações nucleares, etc. O PHITS também é conhecido por permitir aos utilizadores modelar estruturas extremamente complexas com uma grande precisão, permitindo assim aos seus utilizadores avaliar várias quantidades de interesse tais como, distribuição de doses, fluxo de partículas, e energia depositada em materiais, ao longo das várias geometrias simuladas.

O PHITS é maioritariamente utilizado para investigação científica, por exemplo, no campo da física médica, onde é utilizado para calcular a distribuição de doses em radioterapia, mais precisamente, em terapia de prótons e iões pesados, onde a previsão de doses administradas é de extrema importância para o plano de tratamento. Também pode ser utilizado no design de estruturas capazes de bloquear radiação, uma vez que, o PHITS é capaz de testar a efetividade dos materiais de bloqueio contra vários tipos de radiação. Estes dois últimos pontos não foram aqui colocados em vão. Ao juntarmos estes dois chegamos à área de contexto deste trabalho que é - Proteção Radiológica [20, 21].

### 3.4 Desconvolução do espectro

Para determinar o espectro de fótons (no ar) a partir da distribuição de energia medida pelo detetor aplica-se um processo de desconvolução. No caso de fótons monoenergéticos, a comparação entre as funções de resposta do detetor medida e simulada, dá informação suficiente para identificar a energia de emissão.

No caso de fótons com distribuição de energia contínua, como a radiação X, é necessário conhecer um extenso conjunto de funções de resposta, para fótons de diversas energias, contidas no espectro incidente (matriz de resposta). Porém, a desconvolução baseada apenas nestes dois dados de entrada, leva a resultados sem sentido físico, por exemplo, fluências negativas. Por isso, utiliza-se como terceiro dado de entrada, um espectro teórico que melhora o desempenho dos códigos de desconvolução e produz resultados fiáveis.

Os tipos de código de desconvolução mais utilizados são o MAXED, GRAVEL e UNFANA [22], sendo que todos estes têm a mesma finalidade, mas utilizam métodos computacionais e matemáticos diferentes. Será utilizado o código MAXED durante a execução deste projeto. O código MAXED aplica o princípio da entropia máxima para a desconvolução de um problema [22]. A solução para este problema é obtida através da maximização da entropia relativa, estando esta sujeita a restrições impostas pelas medições. Esta abordagem permite a inclusão de informação prévia de forma bem definida e matematicamente consistente, conduzindo assim a um espectro de solução que é uma função não negativa e que pode ser escrito de forma fechada [22–24].

## MATERIAIS E PROCEDIMENTOS

Este capítulo irá demonstrar todo o equipamento utilizado durante a execução deste trabalho, bem como, todos os procedimentos experimentais para obter resultados.

### 4.1 Detetor XR-100T CdTe (AMPTEK, Inc., U.S.A)

Para iniciar este trabalho, a primeira etapa foi a seleção do detetor a ser utilizado. Com base nas considerações apresentadas na secção 2.3, optou-se por um detetor de CdTe para realizar a espectrometria de radiação X no LMRI. Esta escolha foi motivada pelo fato de que os detetores de CdTe são relativamente económicos, fáceis de usar, eficazes na gama de energias desejada e não requerem arrefecimento com azoto líquido.

A escolha recaiu sobre o modelo XR-100T CdTe (AMPTEK, Inc., U.S.A) (ver figura 4.1), pois era o detetor de CdTe disponível no CTN. Este é bastante compacto e portátil tendo de dimensões aproximadas, 11 cm × 5cm × 3cm (comprimento, largura, altura), excluindo colimador de 5 cm. O XR-100T é composto por um detetor de CdTe, um pré-amplificador, um processador de pulsos digitais, um analisador multi-canal e uma fonte de tensão. O sensor de CdTe possui dimensões de 5 mm × 5 mm × 1 mm (comprimento, largura, altura), e está montado sobre um refrigerador termoelétrico que também aloja os componentes principais do pré-amplificador. Este sistema de arrefecimento mantém todos os componentes essenciais do detetor a menos de  $-25\text{ }^{\circ}\text{C}$ , com o objetivo de minimizar o ruído eletrónico [25].



Figura 4.1: Detetor XR-100T CdTe

A janela de entrada do detetor é feita de berílio e tem  $100\ \mu\text{m}$  de espessura. Os elétrodos, localizados na parte superior e inferior, são compostos por camadas finas de materiais específicos: o ânodo é feito de índio com uma espessura de aproximadamente  $100\ \text{nm}$ , enquanto o cátodo é composto de platina com uma espessura de cerca de  $20\ \text{nm}$ . O encapsulamento do detetor é realizado em níquel na extremidade onde está localizado o detetor, e em aço Kovar no restante do dispositivo.

## 4.2 Simulação do detetor

Considerando todos os materiais e dimensões descritos na secção anterior, procedeu-se ao desenho do detetor no PHITS. O resultado desse desenho pode ser visualizado na figura 4.2. É importante notar que o dispositivo de arrefecimento e a 'caixa retangular', que abriga todo o aparato eletrónico, não foram incluídos no desenho. Esta decisão foi tomada porque a presença ou ausência desses componentes não influencia a quantidade de energia depositada no cristal do detetor, o que permite simplificar o desenho.

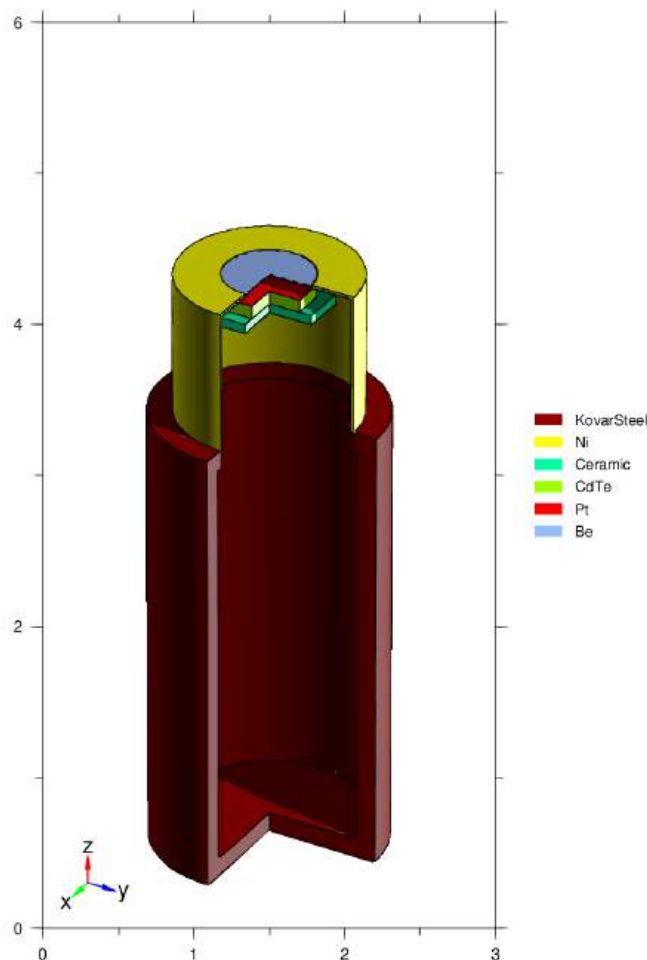


Figura 4.2: Secção transversal do detetor XR-100T CdTe, sem colimador. Simulado no PHITS.

### 4.3 Calibração do detetor para aquisição de espectros experimentais

Após simulado o detetor a ser utilizado, procedeu-se à devida calibração do mesmo. Todas as configurações, a aquisição, e avaliação básica de espectros são realizadas no software disponibilizado pela AMPTEK, DppMCA.

#### 4.3.1 Configurações

Foram realizados diversos testes para ajustar as configurações do detetor, incluindo o número de canais, a temperatura de arrefecimento, o ganho, o *peaking time* e o *flat top width*. O objetivo era otimizar as configurações do detetor para alcançar a melhor resolução possível, sem comprometer a fidelidade dos resultados. Para a realização desses testes, foram utilizadas fontes pontuais de Am-241, Ba-133 e Eu-152.

Os testes indicaram que, para o detetor XR-100T CdTe, os melhores *settings* são: 4096 canais, 220 K de temperatura de arrefecimento,  $4.0\times$  ganho,  $3.0\ \mu\text{s}$  *Peaking Time* e,  $0.4\ \mu\text{s}$  *Flat Top Width*. Estes foram os *settings* que apresentaram melhores resultados. Importante salientar que nenhum destes parâmetros foi alterado ao longo da atividade, uma vez que, a alteração de qualquer um destes, poderia afetar a resposta do detetor.

#### 4.3.2 Reta de calibração do detetor

Através da aquisição dos espectros de Am-241, Ba-133 e Eu-152, foi possível determinar a reta de calibração do detetor, que permite converter os canais em valores de energia em keV. Esta conversão é viável devido às energias bem conhecidas *à priori* dos radionuclídeos mencionados. Atribuindo os picos identificados nos gráficos às energias conhecidas dos fótons gama e raio X (conforme listado na tabela 4.1), foi realizado um ajuste linear, resultando na seguinte equação (Equação 4.1):

$$E[\text{keV}] = 0.07418 \times \text{canal} - 0.13258 \quad (4.1)$$

Com isto é possível termos um gráfico de contagens em função de energia em keV, muito mais simples de ser interpretado.

### 4.4 Determinação da resolução do detetor

Após a calibração do detetor, é necessário determinar a resolução,  $\sigma$ , conforme discutido nas secções 2.4.4 e 2.4.5.

Para calcular a resolução,  $\sigma$ , é necessário termos o gráfico de FWHM em função da energia dos fótons. No entanto, medir a FWHM para cada valor de energia pode ser mais complexo do que parece. Conforme explicado nas secções 2.4 e 2.4.1, os detetores de CdTe apresentam um "efeito cauda" para picos de elevada energia, o que distorce o

Tabela 4.1: Radionuclídeos, seu canal, energia correspondente e FWHM. Valores de energia retirados de [26, 27].

| Radionuclídeo | Canal   | Energia do fóton [keV] | FWHM [keV] |
|---------------|---------|------------------------|------------|
| Am-241        | 189.96  | 13.94                  | 0.387      |
| Am-241        | 241.06  | 17.75                  | 0.412      |
| Am-241        | 356.13  | 26.35                  | 0.424      |
| Ba-133        | 417.96  | 30.80                  | 0.449      |
| Eu-152        | 534.80  | 39.52                  | 0.467      |
| Eu-152        | 541.00  | 40.12                  | 0.470      |
| Eu-152        | 612.12  | 45.35                  | 0.480      |
| Am-241        | 802.50  | 59.54                  | 0.493      |
| Ba-133        | 1090.98 | 81.00                  | 0.544      |
| Eu-152        | 3293.00 | 244.70                 | 0.860      |
| Ba-133        | 4089.04 | 302.85                 | 0.876      |

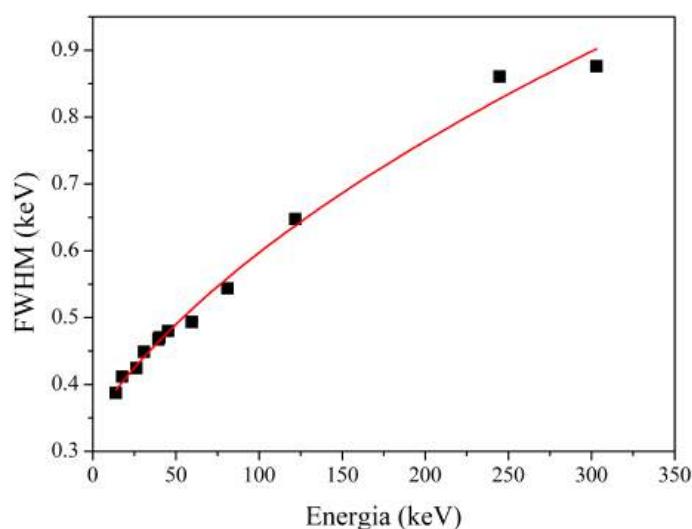


Figura 4.3: Gráfico de FWHM em função da energia com o ajuste feito.

formato gaussiano esperado dos picos. Para mitigar este problema foi utilizado o programa ORIGIN para ajustar uma função gaussiana à parte direita dos picos (a parte não afetada pelo *charge trapping*), obtendo assim os valores de FWHM mais precisos possível. Os valores de FWHM obtidos estão listados na tabela 4.1.

Com base nas informações contidas na tabela 4.1 foi possível realizar um ajuste da resolução,  $\sigma$ . Esse ajuste é feito através da equação,  $FWHM[keV] = 2 \cdot \sqrt{2 \ln 2} \cdot \sigma =$

$a + b\sqrt{E + c}$ , onde  $E$  é a energia dos fótons em keV [10]. Os valores de  $a$ ,  $b$  e  $c$  obtidos através do ajuste são, respetivamente,  $5.941 \times 10^{-2}$ ,  $4.555 \times 10^{-2}$  e 39.35. O ajuste da resolução é apresentado na figura 4.3.

## 4.5 Simulação dos efeitos de Charge Trapping e resolução no detetor

Com a resolução do detetor calculada, a próxima etapa para concluir o modelo analítico descrito na secção 2.4.5 é calcular os parâmetros relacionados ao *charge trapping*. Estes parâmetros são essenciais para entender e quantificar o impacto do efeito de *charge trapping* sobre a resposta do detetor.

### 4.5.1 Extração de dados do PHITS

Para extrair a informação relevante do PHITS, especificamente a energia depositada na célula de CdTe do detetor, é necessário seguir alguns passos meticulosos.

Primeiramente, utilizamos uma *tally* do PHITS denominada [*T-userdefined*]. Esta *tally* gera um documento de texto em formato ASCII que contém todas as informações da simulação realizada. É importante salientar que esses documentos podem ser extremamente grandes, atingindo mais de 60 GB para simulações com energias elevadas. Um exemplo de uma secção deste documento pode ser visualizado na figura 4.4.

Com o documento em mãos, o próximo passo é identificar as interações de interesse. Precisamos de focar em reações dos fótons com a célula do detetor, bem como dos eletrões gerados pela foto-ionização. Estas são assinaladas no ficheiro pelo código 'NCOL=13'. Temos ainda de verificar que o evento ocorreu no material do detetor identificado pelo número da célula. Também é necessário extrair a informação sobre o local da interação que é vital para a avaliação do efeito CCT.

É importante também, estudar as reações de eletrões com energia suficiente para produzir raios X no material do detetor. Estes podem ou não, produzir eventos de escape que são de extrema importância para a aquisição correta do espectro. Todos os dados relevantes para extração encontram-se marcados na figura 4.4.

Tendo feito a extração de forma correta, será de esperar um espectro como o da figura 4.5. Importante salientar que estão a ser utilizados 6040 *bins* de 0.05 keV para a produção de todos os espectros, sendo possível simular espectros de fótons incidentes com energia até 302 keV.

### 4.5.2 Simulação do modelo CCT

Com a extração dos dados concluída, procedeu-se à simulação do modelo de CCT descrito nas secções 2.4.1 e 2.4.3. Neste passo fez-se uso dos parâmetros presentes em [17] como uma primeira aproximação para ajustar o espectro simulado ao espectro experimental.

## CAPÍTULO 4. MATERIAIS E PROCEDIMENTOS

```

40077 NCOL=
40078 13
40079 NO,MAT,ITYP,KTYP,JTYP,MTYP,RTYP,OLDWT=
40080 1 1 14 22 0 0 0.00000000D+00 1.00000000D+00
40081 IBLZ1,IBLZ2,ILEV1,ILEV2=
40082 105 105 0 0
40083 NAME,NCNT(1,2,3)=
40084 1 0 0 0
40085 WT,U,V,W=
40086 1.00000000D+00 -2.95021954D-01 -2.50579518D-01 -9.22047695D-01
40087 E,T,X,Y,Z=
40088 5.95000000D-02 1.72163687D-02 -1.52270808D-01 -1.29332564D-01 4.52410000D+00
40089 EC,TC,XC,YC,ZC=
40090 5.95000000D-02 1.77022407D-02 -1.56568121D-01 -1.32982525D-01 4.51066938D+00
40091 SFX,SFY,SFZ=
40092 0.00000000D+00 0.00000000D+00 0.00000000D+00
40093 NZST=
40094 0
40095 NCLSTS=
40096 4
40097 MATHZ,MATHN,JCOLL,KCOLL= 0 0 13 0
40098 ICLUSTS(i= 1)=
40099 7
40100 JCLUST(j=0-8,i= 1)=
40101 0 0 0 12 0 -1 0 11 0
40102 QCLUST(j=0-12,i= 1)=
40103 0.00000000D+00 6.15702078D-01 6.59184150D-01 4.31725847D-01 5.38684902D-04
40104 5.10998902D-04 0.00000000D+00 2.76860000D-02 1.00000000D+00 1.77022407D-02
40105 -1.56568121D-01 -1.32982525D-01 4.51066938D+00
40106 JCOUNT(j=1-3,i= 1)=
40107 0 0 0
40108 ICLUSTS(i= 2)=
40109 7
40110 JCLUST(j=0-8,i= 2)=
40111 0 0 0 12 -1 -1 0 11 0
40112 QCLUST(j=0-12,i= 2)=
40113 0.00000000D+00 -7.35387130D-01 1.70514042D-02 -6.77432667D-01 5.14646502D-04
40114 5.10998902D-04 0.00000000D+00 3.64760000D-03 1.00000000D+00 1.77022407D-02
40115 -1.56568121D-01 -1.32982525D-01 4.51066938D+00
40116 JCOUNT(j=1-3,i= 2)=
40117 0 0 0

```

Figura 4.4: Secção do userdefined extraído do PHITS.

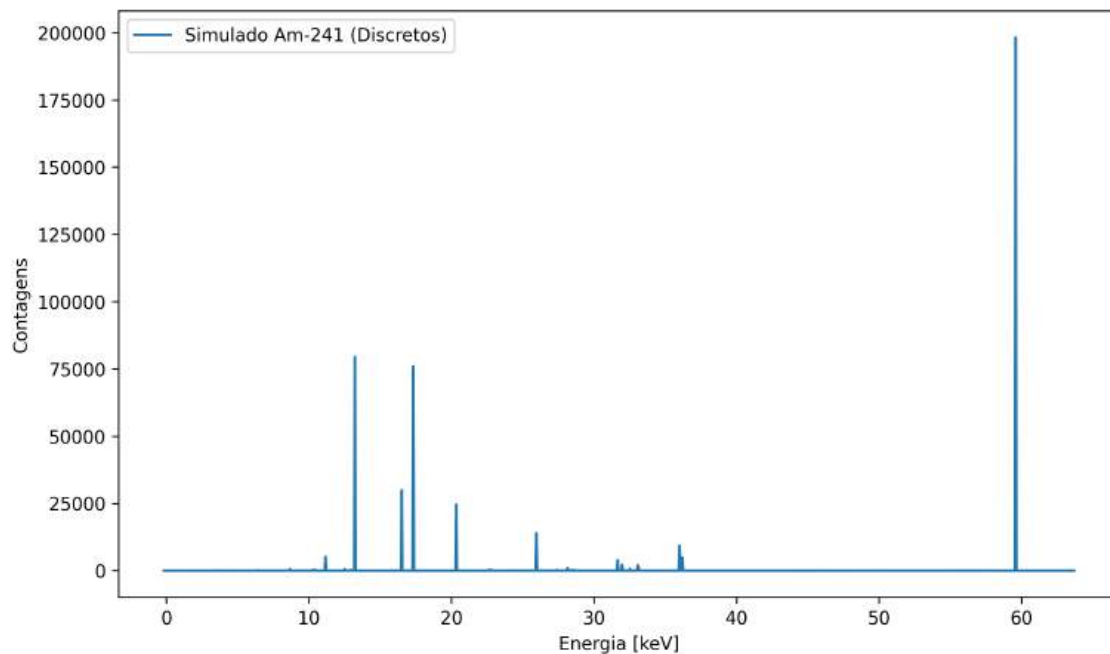


Figura 4.5: Espectro Am-241 apenas com contribuições discretas.

No entanto, foram necessárias algumas modificações para melhor adaptar o modelo às características específicas do nosso detetor. Os parâmetros utilizados, bem como a comparação com outros trabalhos, estão apresentados na tabela 4.2.

Tabela 4.2: Parâmetros utilizados para simular o CTE e o ICC

| Parâmetro   | Este trabalho     | Trabalho [10] <sup>(1)</sup> | Trabalho [28] <sup>(2)</sup> | Trabalho [17] <sup>(3)</sup> |
|-------------|-------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|
| $\lambda_e$ | 11.5 cm           | 15.5 cm                      | 12.3 cm                      | 13.2                         |
| $\lambda_h$ | 0.5 cm            | 1.3 cm                       | 0.73 cm                      | 0.8                          |
| RC          | 0.5               | 0.2                          | 0.2                          | —                            |
| $D/v_s$     | 0.1 $\mu\text{m}$ | 1 $\mu\text{m}$              | 0.2 $\mu\text{m}$            | —                            |
| L           | 1 mm              | 1 mm                         | 1 mm                         | 1 mm                         |

(1) Amptek X-123CdTe, 9 mm<sup>2</sup> área do sensor, 1 mm grossura do sensor.

(2) Amptek XR-100T CdTe, 9 mm<sup>2</sup> área do sensor, 1 mm grossura do sensor.

(3) Amptek XR-100-CdTe, 25 mm<sup>2</sup> área do sensor, 1 mm grossura do sensor.

Após a aplicação dos dados extraídos ao código Python desenvolvido para incorporar os efeitos de *Charge Trapping* (CTE) e *Incomplete Charge Collection* (ICC), o espectro esperado é apresentado na figura 4.6. Neste espectro é evidente o efeito "cauda" resultante dos efeitos CTE e ICC, notavelmente visível no pico de maior energia, de 59.5 keV.

### 4.5.3 Simulação da resolução do detetor

Finalmente, para simular a resolução do detetor, utilizamos a informação obtida na secção 4.4, especificamente o valor de  $\sigma$  em função da energia. Ao aplicar o efeito da resolução aos dados previamente ajustados para os efeitos de CTE e ICC, é possível determinar com precisão a energia de calibração do detetor, com o intuito de proceder à desconvolução dos espectros de fluência fotónica.

Na figura 4.7, está presente os espectros de Am-241, simulado e experimental, de forma a se fazer uma comparação entre ambos. Observa-se que a simulação é bastante semelhante ao que foi captado pelo detetor. As diferenças nas amplitudes de alguns picos são pequenas e podem ser ajustadas, se necessário, através de parâmetros no PHITS, e, que, se realmente fossem importantes, poderiam-se forçar a ser iguais. Na figura 4.7, é também possível observar o pico de 59.5 keV ampliado, onde é feita uma comparação entre o espectro experimental, a energia discreta do fóton incidente de 59.5 keV, um ajuste gaussiano aplicado e o espectro simulado. Esta comparação leva-nos a concluir que os parâmetros escolhidos (Tabela 4.2) são os mais indicados para o nosso detetor.

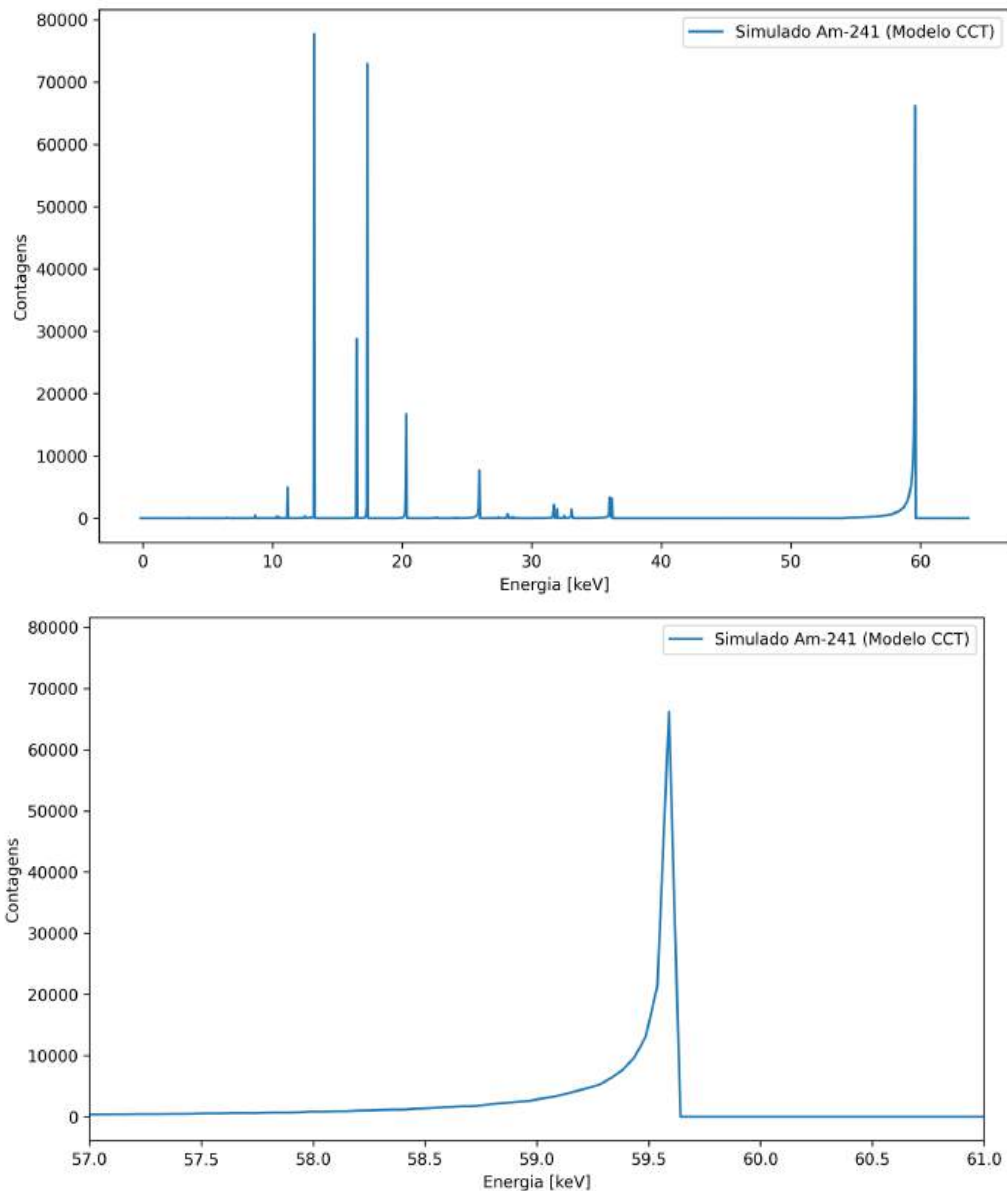


Figura 4.6: Espectro Am-241 com a aplicação do CTE e do ICC. Em cima — Espectro completo. Em baixo — Pico de 59.54 keV ampliado.

## 4.6 Simulação do colimador a ser utilizado no detector

Dado que o objetivo deste trabalho é irradiar o detector com raios X emitidos por uma ampola de raios X no LMRI, é essencial a utilização de um colimador no detector. O colimador serve para reduzir os efeitos da dispersão da radiação, melhorar a resolução e, principalmente, evitar a saturação do detector, uma vez que este será exposto a fótons com alta intensidade.

Foi utilizado um colimador pertencente ao kit fornecido com o detector XR-100T CdTe da AMPTEK (Figura 4.8). Este consiste num corpo e espaçadores de aço inox e um colimador de latão (*brass*) onde é possível montar até 3 discos de tungsténio. Cada um

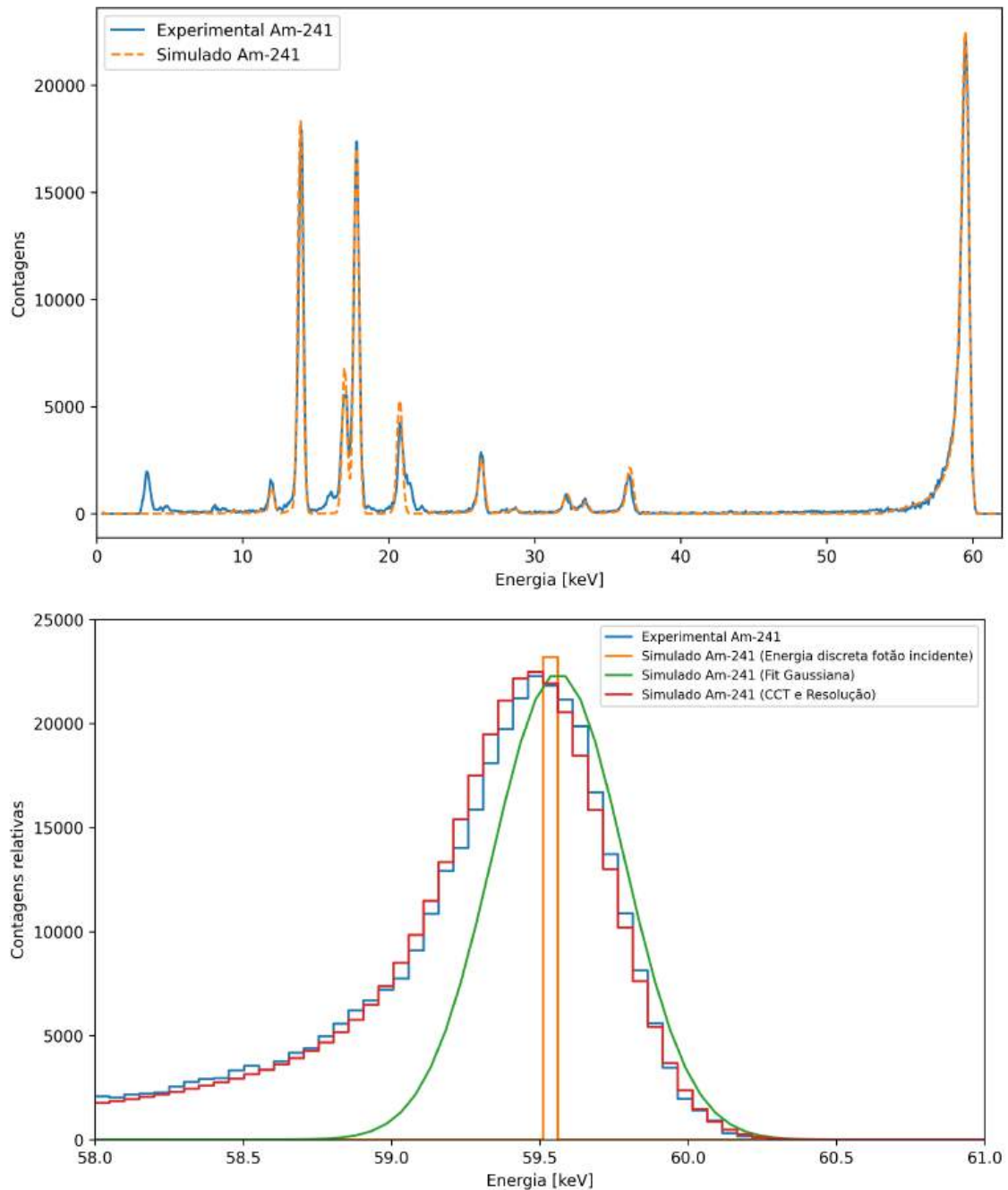


Figura 4.7: Espectro Am-241 com a aplicação da resolução. Em cima — Espectro completo. Em baixo — Pico de 59.54 keV ampliado.

destes discos possui uma abertura central feita a laser, de diversos tamanhos de forma a ajustar ainda mais o fluxo de fótons que atinge o detetor. Estes têm 16 mm de diâmetro, 1 mm de espessura e diversos tamanhos para o diâmetro da abertura ao centro. Para este trabalho, optou-se pelo disco com abertura de  $400 \mu\text{m}$ .

Com base nesta configuração, procedeu-se à simulação do colimador montado no detetor. O desenho do detetor completo pode ser visualizado na figura 4.9.



Figura 4.8: Corpo do colimador, colimador de latão, disco de tungstênio de  $400\ \mu\text{m}$  e espaçadores de aço inox.

#### 4.7 Obtenção da matriz de resposta do detector

A matriz de resposta do detector é composta por todas as respostas do detector a fótons monoenergéticos. Devido à impossibilidade de obter essa matriz experimentalmente com fótons de energia única (não existem fontes que emitem apenas uma única energia), ela deve ser calculada através de simulações MC.

Para obter a matriz de resposta, foram realizadas simulações para fótons com energias que variam de 2 keV a 100 keV, com dois tipos diferentes de incrementos. A tabela 4.3 apresenta as informações detalhadas sobre esses incrementos de energia. Importante salientar que, para simular estas funções de resposta foi utilizado um feixe de fótons monodirecional e paralelo ao colimador. Este feixe foi emitido de uma área circular, perpendicular ao eixo do colimador, com o centro coincidente com esse mesmo eixo. O diâmetro do feixe escolhido foi de  $440\ \mu\text{m}$  uma vez que teria de ser ligeiramente maior que o diâmetro da abertura central do disco de tungstênio utilizado no colimador. O conjunto detector-colimador foi colocado em vácuo e apenas o interior do colimador foi preenchido com ar, como ilustrado na figura 4.9.

Tabela 4.3: Incrementos de energia das funções de resposta do detector.

| Energia dos fótons | Número de funções de resposta | Incrementos de energia das funções de resposta |
|--------------------|-------------------------------|--|
| 2—28               | 26                            | 1 keV  |
| 28—100             | 36                            | 4 keV  |

Na figura 4.10, são apresentados dois exemplos das funções de resposta do detector para fótons monoenergéticos: um com energia de 20 keV e outro com 50 keV. Além dos picos associados à energia primária dos fótons, observa-se, especialmente para o fóton primário de 50 keV, a ocorrência de outros efeitos físicos descritos na seção 2.4.2, como picos de escape do CdTe. Esses picos adicionais resultam das interações secundárias no

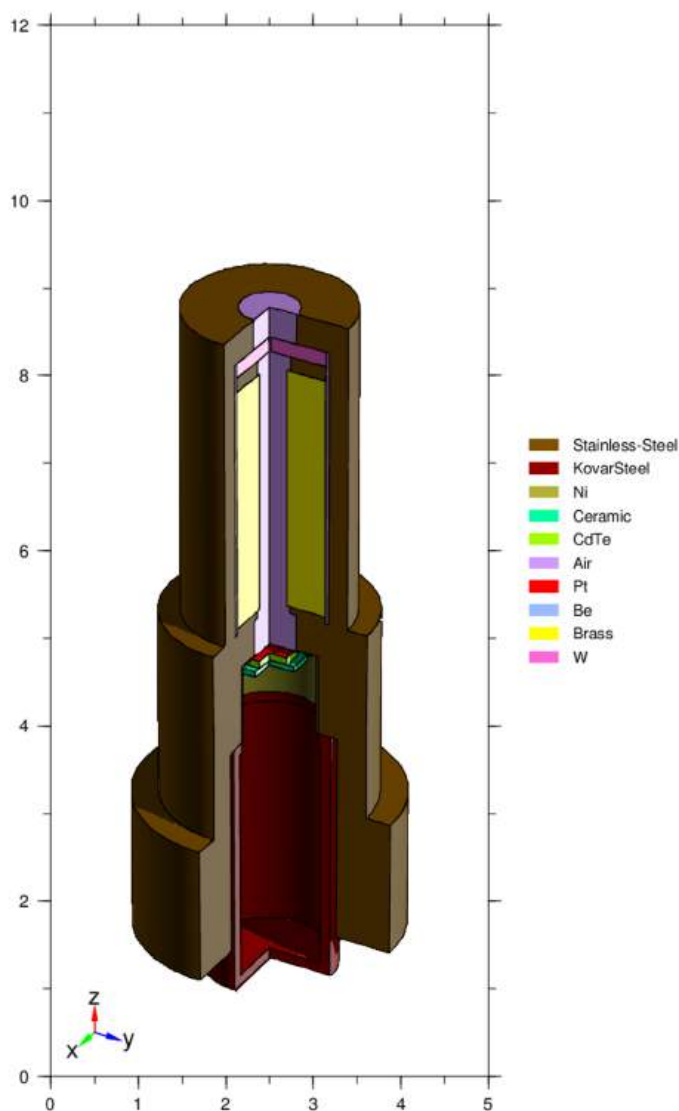


Figura 4.9: Secção transversal do detetor XR-100T CdTe, com a adição do colimador. Simulado no PHITS.

detetor, onde os fótons de energia característica são emitidos após a ionização primária.

A tabela 4.4 fornece uma lista das energias dos picos de escape do CdTe resultantes dessas interações. Vale ressaltar que a observação de picos de escape torna-se possível somente para energias a partir de 30 keV.

Por fim, foi elaborado um gráfico que representa integralmente a matriz de resposta, apresentado na figura 4.11. O eixo  $y$  representa a resposta do detetor em keV, o eixo  $x$  a energia do fóton incidente em keV, e o gradiente de cor indica o número de contagens. Observa-se uma linha acentuada ao longo da diagonal, que representa a energia dos fótons primários. À medida que a energia dos fótons incidentes aumenta, são visíveis os efeitos CCT descritos anteriormente, evidenciados pelo desvanecimento da linha. Isto indica que as contagens do pico principal estão a ser distribuídas pelos canais adjacentes.

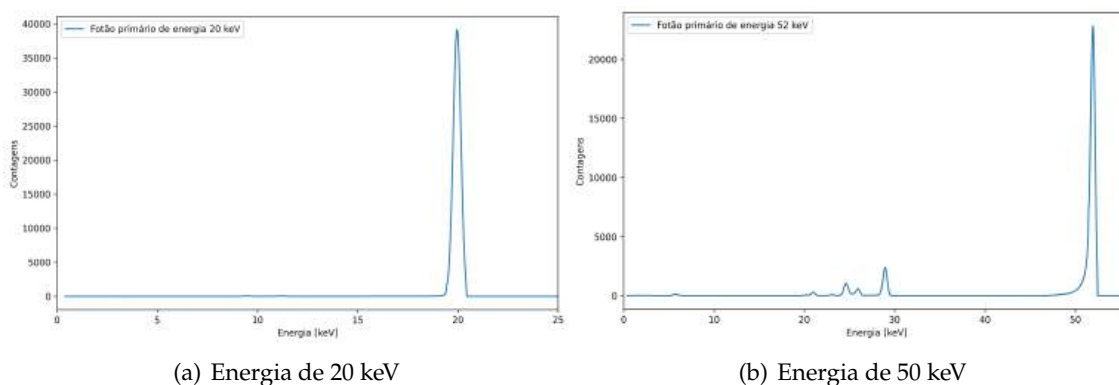


Figura 4.10: Gráficos de funções de resposta do detector.

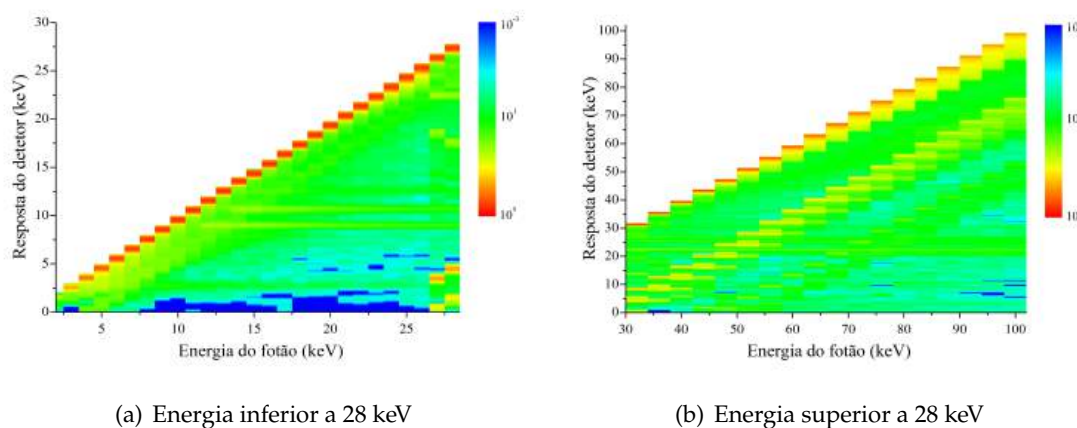


Figura 4.11: Matriz de resposta do detector

A partir dos 28 keV, surgem novas linhas diagonais abaixo da principal, que correspondem aos eventos de escape no CdTe. Estas novas linhas adicionais são uma consequência das interações secundárias dos fótons com o material do detector.

Adicionalmente, é possível identificar, embora de forma discreta, a presença de duas linhas paralelas ao eixo x na figura 4.11(a), próximas dos 10 keV da resposta do detector. Estas linhas são resultantes da fluorescência do disco de 400  $\mu\text{m}$  de tungstênio, utilizado para colimar o feixe.

## 4.8 Aquisição do espectro de raios X

Tendo a matriz de resposta do detector, para podermos proceder à desconvolução de um espectro de raios X, é necessário a aquisição de um espectro de raios X para colocar no software de desconvolução, MAXED.

Tabela 4.4: Energias dos picos pronunciados que ocorrem nas funções de resposta.  $E_{\gamma 0}$  é a energia dos picos resultantes.  $E_{\gamma}$  é a energia dos fótons primários. Adaptado de [24].

| Peak energy (keV)      | Description                      |
|------------------------|----------------------------------|
| $E_{\gamma 0}$         | Full-energy peak                 |
| W fluorescence         |                                  |
| 8–12                   | W $XL_{\alpha,\beta,\gamma}$     |
| Cd and Te escape peaks |                                  |
| $E_{\gamma}-22.957$    | $E_{\gamma}$ -Cd $XK_{\alpha 2}$ |
| $E_{\gamma}-23.153$    | $E_{\gamma}$ -Cd $XK_{\alpha 1}$ |
| $E_{\gamma}-26.040$    | $E_{\gamma}$ -Cd $XK_{\beta 3}$  |
| $E_{\gamma}-26.075$    | $E_{\gamma}$ -Cd $XK_{\beta 1}$  |
| $E_{\gamma}-26.616$    | $E_{\gamma}$ -Cd $XK_{\beta 2}$  |
| $E_{\gamma}-27.187$    | $E_{\gamma}$ -Te $XK_{\alpha 2}$ |
| $E_{\gamma}-27.465$    | $E_{\gamma}$ -Te $XK_{\alpha 1}$ |
| $E_{\gamma}-30.96$     | $E_{\gamma}$ -Te $XK_{\beta 3}$  |
| $E_{\gamma}-31.18$     | $E_{\gamma}$ -Te $XK_{\beta 1}$  |
| $E_{\gamma}-31.68$     | $E_{\gamma}$ -Te $XK_{\beta 2}$  |

#### 4.8.1 Alinhamento do feixe de raios X

Em primeiro lugar, é necessário posicionar a plataforma onde será instalado o detetor a uma distância de 1 metro da fonte de raios X. Esta configuração está em conformidade com as normas estabelecidas pela ISO 4037:2019 [9], que define um valor para o Half Value Layer (HVL) a essa distância, tornando esse valor aplicável apenas para a referida posição específica. Os valores associados podem ser consultados na tabela 3.1, referentes à série N, que será utilizada neste trabalho, mais especificamente a série N-60.

Após posicionar a plataforma corretamente, procedeu-se ao alinhamento do suporte do detetor e de um colimador adicional de chumbo, utilizando os lasers presentes no LMRI para garantir a colimação do feixe de raios X. Este processo é de extrema importância, uma vez que é necessário que o feixe de raios X esteja devidamente colimado e paralelo à entrada do detetor, evitando a irradiação de áreas indesejadas. A figura 4.12 apresenta o aparato experimental utilizado para o alinhamento do feixe de raios X. De salientar que, nesta fase, foi utilizada uma película radiográfica como alvo para verificar a dimensão do campo de raios X.

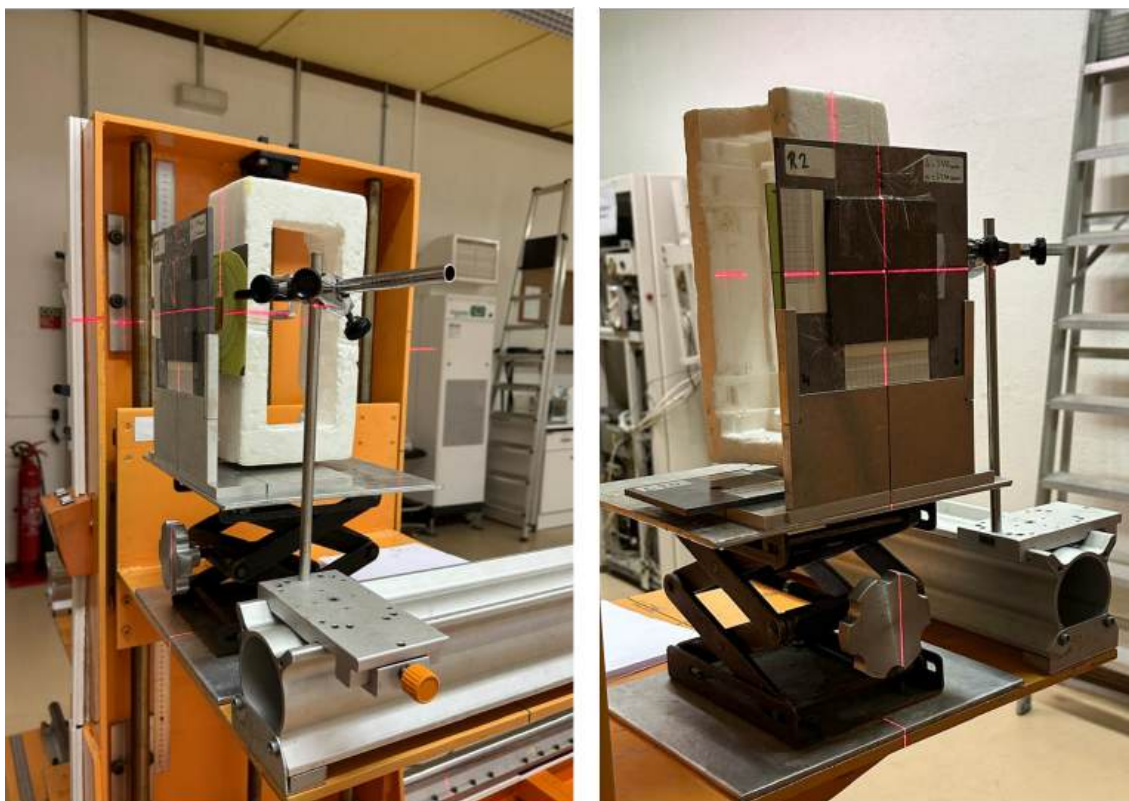


Figura 4.12: Aparato experimental para alinhamento do feixe de raios X

#### 4.8.2 Determinação do tamanho de campo

Após a realização do alinhamento, efetuou-se uma irradiação rápida com o objetivo de determinar o diâmetro do campo de raios X que incide sobre o detetor. Na Figura 4.13, é apresentado o resultado da irradiação na película radiográfica. O tamanho do campo de raios X foi determinado com base no número de píxeis ao longo da linha vermelha traçada no centro do campo. O gráfico demonstrado indica que o diâmetro do campo de raios X é de aproximadamente 60 píxeis, o que, considerando que cada píxel mede em média 0.26 mm, corresponde a um diâmetro aproximado de 15.6 mm.

#### 4.8.3 Aparato experimental final

Antes de iniciar a aquisição do espectro de raios X, é imprescindível posicionar o detetor de forma adequada, de modo a que este fique centralizado com o campo de raios X previamente definido. A figura 4.14 apresenta a configuração experimental final utilizada para a obtenção do espectro de raios X. Na referida figura, à direita, pode-se observar a variedade de filtros da série N, posicionados em frente ao feixe de raios X emitido, os quais serão utilizados para a aquisição dos espectros em conformidade com a norma ISO 4037:2019. O feixe de raios X é emitido junto à parede e de forma perpendicular à mesma, na direção do detetor.

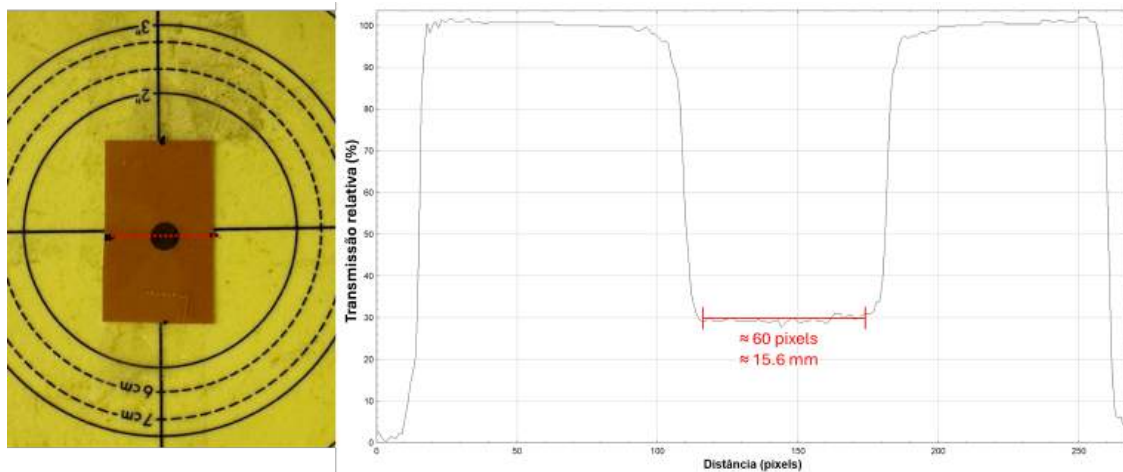


Figura 4.13: Determinação do tamanho do campo de raios X que atingem o detector. Esquerda — Aparecimento do campo na película radiográfica. Direita — Gráfico de transmissão relativa em função de distância em pixels para determinação do tamanho de campo



Figura 4.14: Aparato experimental final para aquisição do espectro de raios X

Ao comparar a figura 4.12 com a figura 4.14, é possível verificar que o detector não se encontra na mesma posição que o alvo com a película radiográfica. Esta distância foi tida em conta e foi compensada movimentando todo o conjunto cerca de 18 cm como ilustrado na figura 4.15. É importante referir que o tamanho de campo na nova posição do detector é diferente da previamente calculada, sendo este ligeiramente maior que o previamente calculado.

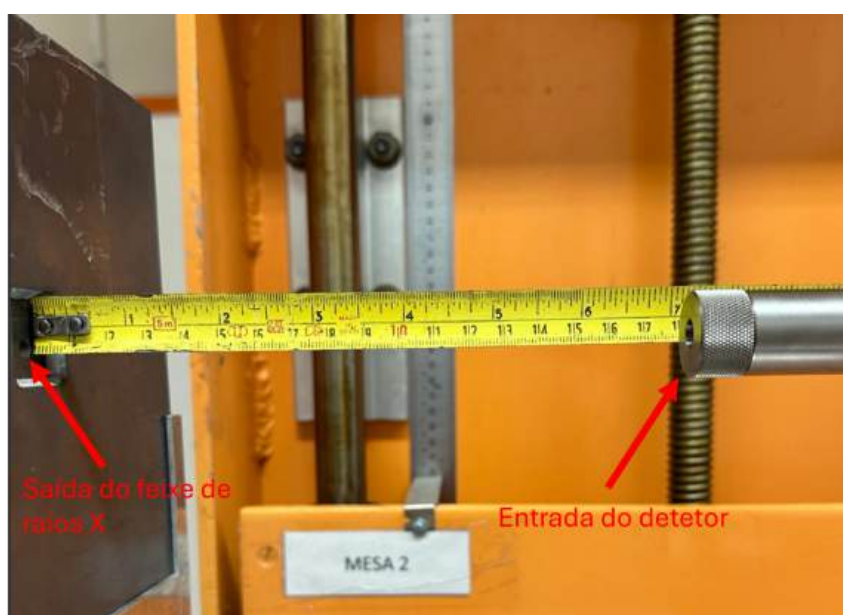


Figura 4.15: Distância do detetor à posição do alvo anteriormente utilizado

#### 4.8.4 Irradiação do detetor

Após a conclusão de todos os preparativos descritos nas secções anteriores e a realização das ligações eletrónicas necessárias, procedeu-se à irradiação do detetor com o objetivo de obter um espectro experimental de raios X. Todos os controlos associados à fonte de raios X — tais como a tensão aceleradora dos eletrões (em kV) e a corrente gerada pelos eletrões devido ao efeito termiónico (em mA) — são operados a partir do exterior da sala devidamente blindada, sendo monitorizados através do equipamento ilustrado na figura 4.16. A aquisição do espectro em tempo real é realizada por meio do software disponibilizado pela AMPTEK, acessível num computador localizado fora da sala.

Foram efetuadas 4 aquisições diferentes, alterando a tensão da fonte de raios X e a respetiva filtração colocada na fonte de acordo com a tabela 3.1, que contém as condições de filtração definidas pela norma ISO 4037:2019, de forma a poder observar os efeitos resultantes dessas mudanças nos espectros de raios X adquiridos. Foram feitas aquisições com 60 kV, 80 kV e 100 kV, que correspondem, respetivamente, às séries N-60, N-80 e N-100. A última foi apenas um espectro de fundo para posteriormente se subtrair dos espectros obtidos. Na figura 4.17, pode ser observado os três espectros de raios X obtidos experimentalmente referentes às séries N-60, N-80 e N-100.

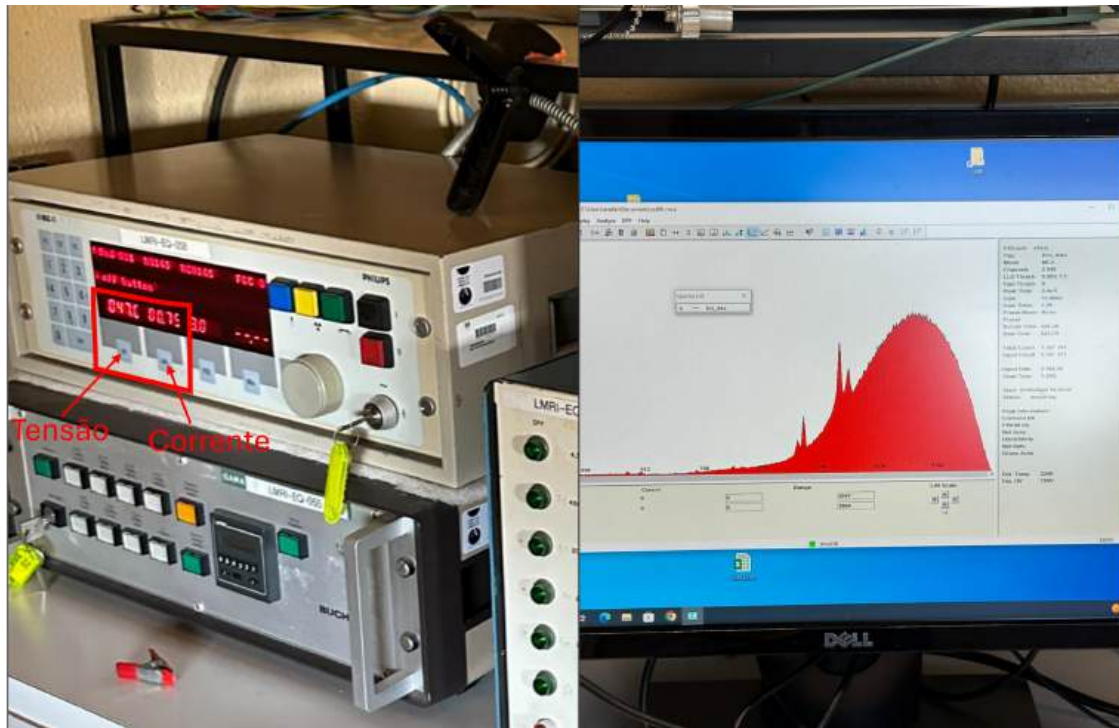


Figura 4.16: Controlo dos parâmetros de produção de raios X e espectro de raios X experimental.

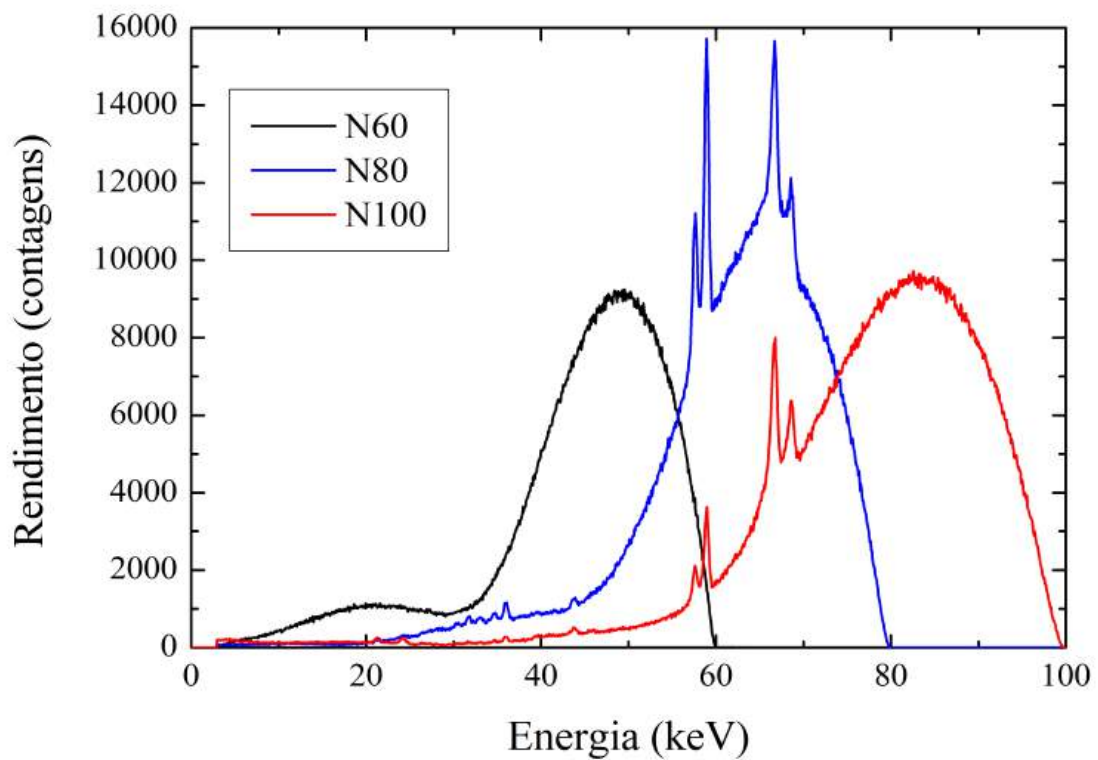


Figura 4.17: Espectros de raios X experimentais das séries N-60, N-80, N-100.



## RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 5.1 Desconvolução

A desconvolução correta é um passo fundamental na implementação da espectrometria de radiação  $X$ , pois é através dela que se recupera a informação original dos raios  $X$  gerados. Os espectros obtidos encontram-se convoluídos com a função de resposta do detector, sendo necessário um processo de desconvolução para extrair a natureza física real do feixe emitido, removendo as distorções inerentes ao sistema de detecção. Em termos simplificados, o espectro observado,  $S_{observado}(E)$ , resulta da convolução entre o espectro real,  $S_{real}(E)$ , e a função de resposta do detector,  $R(E)$ , conforme descrito na equação 5.1.

$$S_{observado}(E) = S_{real}(E) * R(E) \quad (5.1)$$

Neste caso, o símbolo  $*$  representa a convolução. A equação demonstra que cada ponto no espectro observado é uma combinação de vários pontos do espectro real, misturados com a função de resposta do detector. O objetivo da desconvolução é aplicar métodos matemáticos, como algoritmos de desconvolução, para recuperar o espectro real,  $S_{real}(E)$ .

Para realizar a desconvolução do espectro de raios  $X$  adquirido, foram utilizados três conjuntos de dados: a função de resposta do detector, um espectro teórico do detector gerado pelo software SpekPy, e o espectro de raios  $X$  medido experimentalmente. Estes três elementos constituíram os dados de entrada para o software de desconvolução utilizado, o MAXED. Contudo, este processo revelou-se mais complexo do que o esperado inicialmente.

A abordagem inicial envolveu o uso da matriz de resposta calculada a partir dos valores simulados no PHITS. No entanto, essa estratégia não produziu resultados úteis para o caso mais simples, com o feixe de 60 kV, uma vez que os espectros de desconvolução apresentavam picos fora da gama de energias dos raios  $X$  gerados e valores de contagem por canal extremamente baixos. Isto indicou a existência de problemas no processo de desconvolução. Após uma análise detalhada, concluiu-se que o problema residia na matriz de resposta utilizada, dado que os intervalos de energia dos fótons monoenergéticos incidentes eram demasiado amplos e irregulares (1 keV, 4 keV). Para resolver essa questão,

seria necessário recalcular a matriz de resposta com intervalos de 1 keV, 0.5 keV, ou até mesmo 0.25 keV. Todavia, essa opção revelou-se impraticável no contexto desta tese devido aos elevados custos computacionais, nomeadamente o tempo de aquisição e o espaço de armazenamento necessário.

A solução encontrada foi a utilização de interpolação para obter uma matriz de resposta com intervalos de energia mais finos, a partir dos espectros de resposta já disponíveis. Inicialmente, realizou-se uma interpolação com intervalos de 1 keV, o que resultou em melhorias significativas na desconvolução, eliminando contagens fora do intervalo de energias esperado, conforme indicado pelo espectro teórico gerado pelo SpekPy. Além disso, observou-se uma maior semelhança entre o formato do espectro obtido e o espectro teorizado.

Posteriormente, efetuou-se uma nova interpolação com intervalos de 0.5 keV, o que produziu uma concordância ainda maior entre o espectro obtido e o esperado. Ademais, com os intervalos de 0.5 keV, os resultados tornaram-se quase insensíveis às variações de outros parâmetros, algo que não ocorria com intervalos de 1 keV. Essa maior estabilidade reforça a qualidade da nova matriz de resposta.

A nova matriz de resposta com intervalos de energia de 0.5 keV, obtida por interpolação, pode ser visualizada na figura 5.1. É possível verificar que esta apresenta uma melhor resolução comparativamente à matriz de resposta presente no capítulo anterior, na figura 4.11, comprovando a eficácia da interpolação ao acrescentar novos pontos com intervalos de 0.5 keV.

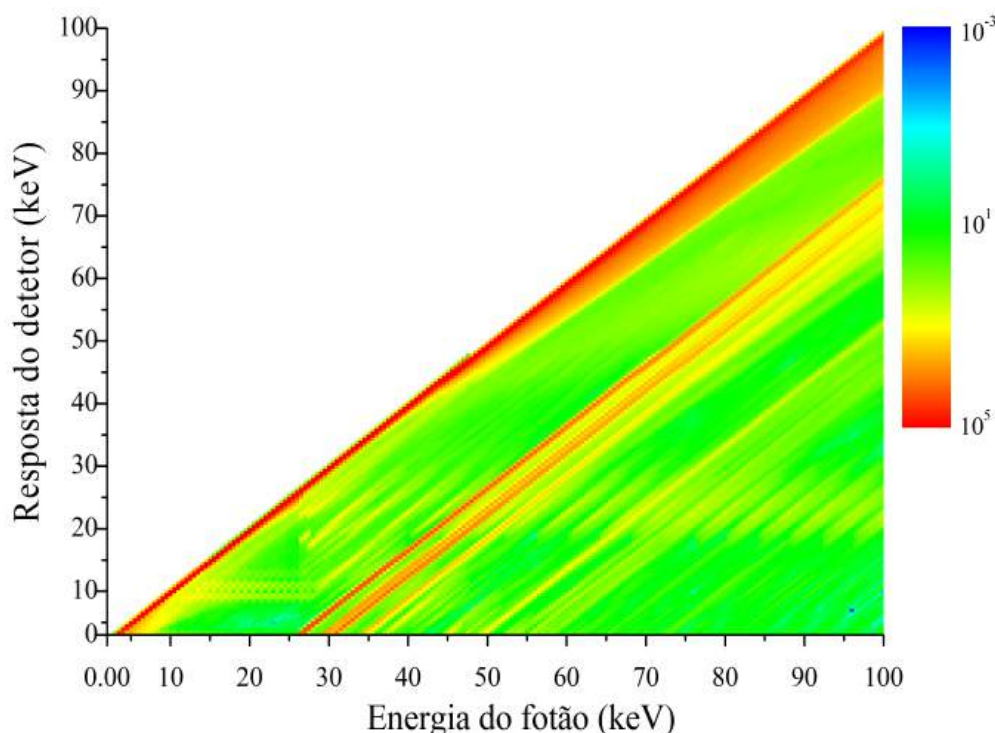


Figura 5.1: Nova matriz de resposta com intervalos de 0.5 keV obtida por interpolação.

Fazendo uma média dos vários espectros obtidos através da desconvolução para a série N-60 (Figura 5.2), caracterizada pela utilização de um feixe de 60 kV, já é possível observar um espectro com bastante semelhança ao espectro teorizado do SpekPy, demonstrando o sucesso desta abordagem para o aperfeiçoamento do processo de desconvolução. É possível visualizar na figura 5.3 o que foi mencionado anteriormente.

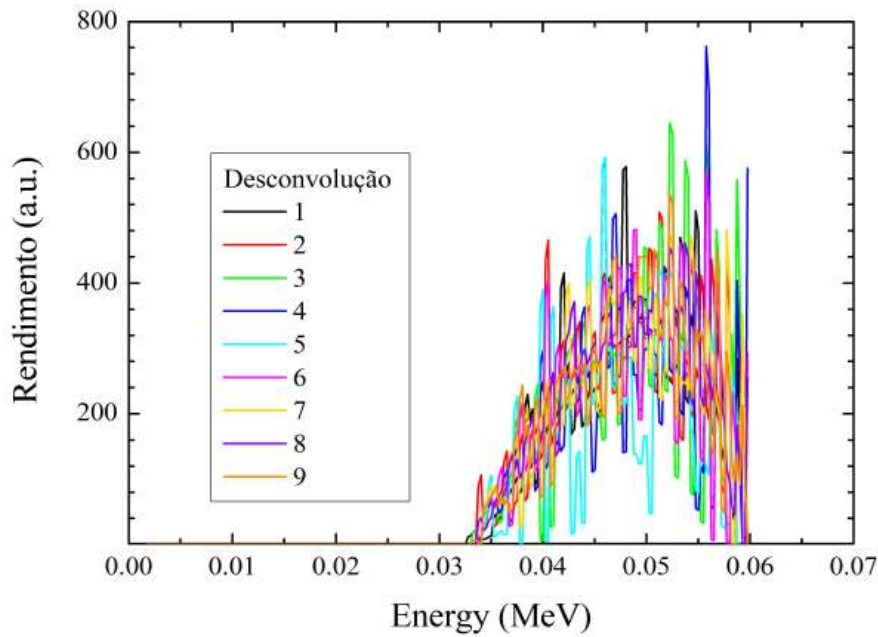


Figura 5.2: Exemplos de nove espectros de desconvolução.

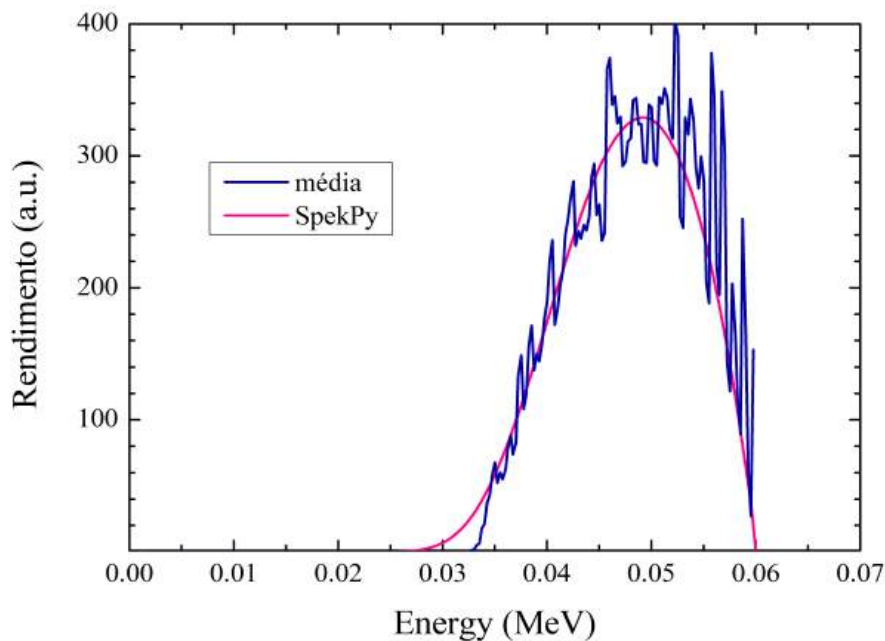


Figura 5.3: Média dos nove espectros de desconvolução comparado com o espectro SpekPy.



## CONCLUSÃO

A conclusão deste trabalho, intitulado "Espectrometria de Radiação X para Metrologia em Proteção Radiológica", refletiu a abrangência e relevância dos resultados obtidos, ao mesmo tempo que aponta limitações e oportunidades de aprimoramento futuro. Ao longo deste estudo, foram investigados e aplicados métodos avançados de espectrometria de radiação X, com especial ênfase no uso de detectores de CdTe, o desenvolvimento de simulações de resposta dos detetores e a desconvolução de espectros de raios X.

A importância da proteção radiológica foi destacada desde o início, com foco nas grandezas operacionais e sua relevância para a metrologia em radiações ionizantes. Este contexto teórico forneceu a base para o desenvolvimento de procedimentos experimentais robustos, que culminaram na calibração e uso de detectores semicondutores como o XR-100T CdTe. A capacidade de medir e caracterizar com precisão os espectros de radiação é fundamental para assegurar a confiabilidade dos dispositivos de monitoramento utilizados em ambientes de exposição à radiação.

Os resultados obtidos com a aplicação de simulações Monte Carlo (MC) no código PHITS demonstraram a eficácia da modelagem do transporte de partículas e a importância de calcular adequadamente a matriz de resposta do detetor. O uso dessas ferramentas permitiu a otimização das condições experimentais e a caracterização detalhada das respostas do detetor para diferentes energias de fótons.

Particularmente relevante foi a aplicação do processo de desconvolução dos espectros. Este método, essencial para a obtenção de dados precisos dos fótons emitidos a partir das medições dos detetores, envolveu a utilização do código MAXED, que aplicou o princípio da entropia máxima para produzir espectros fisicamente significativos. A eficácia deste processo foi demonstrada pelos resultados da desconvolução que, embora satisfatórios em grande parte das energias, revelaram também desafios que deverão ser superados em estudos futuros.

Entre os pontos de aprimoramento identificados, destaca-se a possibilidade de reduzir os intervalos de energia utilizados na interpolação, sugerindo o uso de intervalos menores, como 0.25 keV, o que permitiria maior precisão na análise dos dados. Além disso, o uso do método de suavização Savitzky-Golay foi proposto como uma solução promissora

para eliminar oscilações indesejadas nos resultados da matriz de resposta. Com maior disponibilidade de tempo, uma opção seria, apesar do seu elevado custo computacional, a aquisição de espectros de resposta com intervalos de energia de 0.25 keV. O tempo limitado disponível para este trabalho impediu que a desconvolução dos espectros experimentais para energias superiores, como 80 keV e 100 keV, fosse realizada.

Em suma, este trabalho contribuiu de maneira significativa para o avanço da espectrometria de radiação X no contexto da metrologia em proteção radiológica, demonstrando a viabilidade técnica e científica da utilização de detetores de CdTe e metodologias de desconvolução. As recomendações aqui apresentadas apontam para a continuidade e expansão desta linha de pesquisa, com vistas à obtenção de resultados ainda mais precisos e aplicáveis a um amplo espectro de situações práticas.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] J. M. Lourenço. *The NOVAtesis L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X Template User's Manual*. NOVA University Lisbon. 2021. URL: <https://github.com/joaomlourenco/novathesis/raw/main/template.pdf> (ver p. i).
- [2] I. L. Organization. *Radiation Protection (Occupational Safety and Health)*. 2024. URL: <https://www.ilo.org/safework/areasofwork/radiation-protection/lang-en/index.htm> (ver p. 1).
- [3] Portugal. *Decreto-Lei n.º 108/2018 de 3 de dezembro*. Diário da República n.º 180/2018. 2018 (ver p. 1).
- [4] International Commission on Radiation Units and Measurements (ICRU). *Report 95: Operational Quantities for External Radiation Exposure*. Technical Report 95. ICRU Report 95. Bethesda, MD: International Commission on Radiation Units e Measurements, 2024 (ver p. 1).
- [5] Campus Tecnológico Nuclear (CTN). *Serviço de Proteção Radiológica*. 2024. URL: <https://www.ctn.tecnico.ulisboa.pt/sec/psr/index.html> (ver p. 1).
- [6] Portugal. *Despacho n.º 1178/2023 de 24 de janeiro*. Instituto Português da Qualidade, I. P. Diário da República. 2023 (ver p. 1).
- [7] Portugal. *Portaria n.º 356/2023 de 14 de novembro*. Diário da República. 2023 (ver p. 1).
- [8] Instituto Superior Técnico. *Despacho n.º 3310/2020*. 2024. URL: [https://www.ctn.tecnico.ulisboa.pt/sec/psr/2020\\_Despacho3310\\_IST.pdf](https://www.ctn.tecnico.ulisboa.pt/sec/psr/2020_Despacho3310_IST.pdf) (ver p. 1).
- [9] International Organization for Standardization. *Radiological Protection — X and Gamma Reference Radiation for Calibrating Dosimeters and Doserate Meters and for Determining Their Response as a Function of Photon Energy*. ISO Standard No. 4037:2019. 2024. URL: <https://www.iso.org/standard/4037.html> (ver pp. 2, 11, 12, 27).
- [10] J. Šolc et al. «Practical X-ray beam spectrometry with cadmium telluride detector in 10-300 kVp range at Czech Metrology Institute. Part I. Instrumentation». Em: *Journal of Instrumentation* 17 (10 2022-10). ISSN: 17480221. DOI: 10.1088/1748-0221/17/10/P10002 (ver pp. 2, 6–8, 10, 19, 21).

- [11] S. Prabhu et al. «Production of X-RAYS using X-RAY Tube». Em: vol. 1712. IOP Publishing Ltd, 2020-12. DOI: 10.1088/1742-6596/1712/1/012036 (ver pp. 3, 4).
- [12] Radiology Cafe. *Production of X-Rays*. 2024. URL: <https://www.radiologycafe.com/frcr-physics-notes/x-ray-imaging/production-of-x-rays/> (ver pp. 3–5).
- [13] M. R. do Nascimento et al. «Intrinsic challenges in x-ray spectrometry instrumentation with CdTe diode detector». Em: *Brazilian Journal of Radiation Sciences* 9 (2C 2021-08). ISSN: 2319-0612. DOI: 10.15392/bjrs.v9i2C.1665. URL: <https://www.bjrs.org.br/revista/index.php/REVISTA/article/view/1665> (ver pp. 5–7).
- [14] S. N. Ahmed. «2 - Interaction of radiation with matter». Em: *Physics and Engineering of Radiation Detection (Second Edition)*. Ed. por S. N. Ahmed. Second Edition. Elsevier, 2015, pp. 65–155. ISBN: 978-0-12-801363-2. DOI: <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-801363-2.00002-4>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780128013632000024> (ver p. 6).
- [15] A. MOHAMMADI, M. BABA e H. HIRAYAMA. «Simulation of the Carrier Trapping Effect in a Schottky CdTe Detector by Considering a Nonuniform Electric Field». Em: *Journal of Nuclear Science and Technology* 46 (11 2009-11), pp. 1032–1037. ISSN: 0022-3131. DOI: 10.1080/18811248.2009.9711613 (ver p. 7).
- [16] I. Amptek. *Charge Trapping in XR-100T-CdTe Cadmium Telluride Detectors Application Note*. <https://www.amptek.com/internal-products/app-notes/charge-trapping-in-xr-100t-cdte-cadmium-telluride-detectors-application-note>. Accessed: 2024-09-07. 2024 (ver p. 8).
- [17] R. Redus. *Charge Trapping in XR-100T-CdTe and-CZT Detectors. Application Note ANCZT-2 Rev. 3*. Application note made by Bob Redus on behalf of AMPTEK Inc. AMPTEK Inc., 2007 (ver pp. 8, 9, 19, 21).
- [18] R. H. Redus et al. «Characterization of CdTe detectors for quantitative X-ray spectroscopy». Em: vol. 56. 2009-08, pp. 2524–2532. DOI: 10.1109/TNS.2009.2024149 (ver p. 8).
- [19] B. Redus. *Efficiency of Amptek XR-100T-CdTe and-CZT Detectors. Application Note ANCZT-1 Rev 2*. Application note made by Bob Redus on behalf of AMPTEK Inc. AMPTEK Inc., 2002 (ver p. 9).
- [20] T. Sato et al. «Features of Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) version 3.02». Em: *Journal of Nuclear Science and Technology* 55 (6 2018-06), pp. 684–690. ISSN: 00223131. DOI: 10.1080/00223131.2017.1419890 (ver p. 13).
- [21] PHITS Development Team. *PHITS: Particle and Heavy Ion Transport code System*. 2024. URL: <https://phits.jaea.go.jp/> (ver p. 13).

- [22] M. Reginatto, P. Goldhagen e S. Neumann. «Spectrum unfolding, sensitivity analysis and propagation of uncertainties with the maximum entropy deconvolution code MAXED». Em: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 476 (1-2 2002-01), pp. 242–246. ISSN: 01689002. DOI: 10.1016/S0168-9002(01)01439-5. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0168900201014395> (ver p. 14).
- [23] M. Reginatto. «Overview of spectral unfolding techniques and uncertainty estimation». Em: vol. 45. 2010-12, pp. 1323–1329. DOI: 10.1016/j.radmeas.2010.06.016 (ver p. 14).
- [24] J. Šolc et al. «Practical X-ray beam spectrometry with cadmium telluride detector in 10-300 kVp range at Czech Metrology Institute. Part II. Unfolding». Em: *Journal of Instrumentation* 17 (10 2022-10). ISSN: 17480221. DOI: 10.1088/1748-0221/17/10/P10003 (ver pp. 14, 27).
- [25] AMPTEK, Inc. *XR-100T CdTe Detector User Operating Manual*. AMPTEK, Inc. U.S.A., 2004. URL: <https://www.amptek.com/internal-products/xr-100cdte-x-ray-and-gamma-ray-detector> (ver p. 15).
- [26] *JANIS: Java-based Nuclear Information Software*. Accessed: 2024-09-02. OECD Nuclear Energy Agency (NEA), 2024. URL: <https://www.oecd-nea.org/janisweb/> (ver p. 18).
- [27] M. C. Lépy, J. Plagnard e L. Ferreux. «Measurement of <sup>241</sup>Am L X-ray emission probabilities». Em: *Applied Radiation and Isotopes* 66 (6-7 2008-06), pp. 715–721. ISSN: 09698043. DOI: 10.1016/j.apradiso.2008.02.078 (ver p. 18).
- [28] A. Tomal et al. «Response functions of Si(Li), SDD and CdTe detectors for mammographic x-ray spectroscopy». Em: *Applied Radiation and Isotopes* 70 (7 2012), pp. 1355–1359. ISSN: 18729800. DOI: 10.1016/j.apradiso.2011.11.044 (ver p. 21).







# 2024 Espectrometria de Radiação X para Metrologia em Proteção Radiológica João Nunes

