

Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Validação do Geant4 para a produção e detecção de raios X na faixa de energia de radiodiagnóstico

Daniel Alexandre Baptista Bonifácio

Orientador: Prof. Dr. Maurício Moralles

Dissertação de mestrado apresentada ao Instituto de Física para a obtenção do título de Mestre em Ciências.

Banca examinadora:

Prof. Dr. Maurício Moralles (CNEN/IPEN-SP)

Prof. Dra. Elisabeth Mateus Yoshimura (IF-USP)

Prof. Dr. Hélio Yoriyaz (CNEN/IPEN-SP)

São Paulo - 2007

Este trabalho contou com apoio financeiro do CNPq.

FICHA CATALOGRÁFICA
Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Bonifácio, Daniel Alexandre Baptista

Validação do Geant4 para a produção e detecção de raios X na faixa de energia de radiodiagnóstico.
São Paulo, 2007.

Dissertação (Mestrado) - Universidade de São Paulo.
Instituto de Física, Departamento de Física Nuclear

Orientador: Prof. Dr. Maurício Moralles

Área de Concentração: Física

Unitermos: 1. Física médica 2. Método de Monte Carlo; 3. Espectroscopia de raios X; 4. Produção de raio X.

USP/IF/SBI-025/2007

Aos meus pais

Valdir e Lídia,

aos meus irmãos

Adriana e Fábio,

e aos meus sobrinhos

Juliana e Wladimir.

Agradecimentos

Ao Prof. Dr. Maurício Moralles, pela orientação, amizade, dedicação e apoio.

Ao amigo Hélio Murata, pelas valiosas discussões sobre orientação a objetos.

Ao amigo Márcio Bottaro, pelo auxílio prestado nas medições dos espectros de raios X utilizados neste trabalho.

Aos amigos, Dr. Marco Aurélio Guedes Pereira, Prof. Dr. Sílvio Bruni Herdade, Prof. Dr. Ricardo Terini, Prof. Dr. Paulo Roberto Costa, Juliana Dias Gonçalves e Edson Pereira Barbosa, pela colaboração, motivação e paciência.

Ao PhD. Mohamad Reza Ay, pela contribuição no fornecimento de alguns dados de referência utilizados neste trabalho.

Ao PhD. Robert Redus, pelas informações precisas e detalhadas sobre as características físicas do detector utilizado neste trabalho.

Aos funcionários e colegas do Instituto de Eletrotécnica e Energia da Universidade de São Paulo, pela amizade e incentivo na realização deste trabalho.

À minha família, pelo carinho e presença motivadora.

À diretoria do Instituto de Eletrotécnica e Energia da Universidade de São Paulo, pelo apoio prestado durante o desenvolvimento deste trabalho.

Ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo, pela oportunidade para a realização deste trabalho.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, pelo apoio financeiro.

Resumo

Este trabalho teve como objetivo validar uma ferramenta computacional para a realização de simulações da interação de elétrons e da radiação X com a matéria, utilizando o método de Monte Carlo para possíveis estudos em radiologia diagnóstica. Para esse propósito, foi desenvolvido um programa computacional que simula a produção de radiação de um equipamento de raios X, com a finalidade de obter a distribuição de energia dos fótons que alcançam uma determinada região de interesse, sem a necessidade de medições experimentais. Outra tarefa realizada neste trabalho foi o cálculo da resposta de um detector do tipo CdTe, para possibilitar a correção de espectros medidos com esse detector em experimentos na faixa de energia de radiodiagnóstico.

A ferramenta computacional escolhida para essas aplicações foi o Geant4, que é um conjunto de programas de distribuição livre relativamente novo e que é utilizado para simulações da interação da radiação com a matéria. Um dos principais diferenciais do Geant4 é o emprego da tecnologia de programação orientada a objetos e de técnicas avançadas de engenharia de software.

Os resultados da etapa de simulação de espectros de energia produzidos por um equipamento de raios X mostram que o Geant4 pode ser utilizado para esta aplicação, mas com ressalvas na simulação de espectros de raios X com alvos com molibdênio para a região de mamografia, que é a situação onde as diferenças dos rendimentos de raios X característicos dos espectros simulados com os seus respectivos espectros de referência são maiores.

Na etapa de simulação da detecção da radiação X por um detector do tipo CdTe são apresentados resultados com excelente acordo com os dados de referência. As diferenças encontradas devem ser mais influenciadas pelos efeitos de armadilhamento de cargas e do comportamento do campo elétrico no interior do cristal do detector, que são específicos para este detector e não fazem parte dos modelos físicos fornecidos pelo Geant4.

Desta forma, a validação do Geant4 realizada neste trabalho mostrou algumas das possibilidades de uso desta versátil ferramenta na área de radiologia diagnóstica.

Abstract

The aim of this work was the validation of a computational tool applied in simulations of electrons and X ray interactions with matter, using the Monte Carlo method for possible studies in diagnostic radiology. To perform this task, a computational program was developed to simulate the radiation production of a X ray equipment, with the purpose of obtaining the photon energy distribution which comprehends the region of interest, without the necessity of experimental measurements. Another task carried through in this work was the calculation of a CdTe detector response, which was used in the correction of measured spectra with energy distribution typically found in diagnostic radiology.

The employed computational tool was Geant4, which is a free distribution set of computational programs used for simulation of the passage of particles through matter. One of the main differentials of Geant4 is the exploitation of advanced software-engineering techniques and object-oriented technology.

The results of the simulation of energy spectra produced by a X ray equipment show that Geant4 can be used for this application, but with restrictions concerning the simulation of X ray spectra from molybdenum targets in the mammography energy range. This is the situation where the differences of the characteristic X ray yield between the simulated and reference spectra are more pronounced.

For the simulation of X ray measurements with a CdTe detector, the results showed excellent agreement with the reference data. In this case the discrepancies must be originated mainly by effects of charge trapping and the nonuniformity of the electric field inside the CdTe crystal.

In resume, the validation of the Geant4 carried through in this work showed some of the possibilities for the use of this versatile tool in diagnostic radiology.

Sumário

Lista de Figuras	xiii
Lista de Tabelas	xvii
1 Introdução	1
2 Conceitos fundamentais	5
2.1 Transporte de radiação utilizando o método de Monte Carlo	5
2.1.1 O método de Monte Carlo	5
2.1.2 Descrição do processo de transporte de radiação	5
2.2 O código de simulação computacional Geant4	6
2.2.1 Introdução ao Geant4	6
2.2.2 História do Geant4	7
2.2.3 Aspectos técnicos do Geant4	8
2.2.4 Projeto e arquitetura	12
2.2.5 Os modelos físicos eletromagnéticos do Geant4	13
2.2.6 Cortes de passagem e limites de produção de partículas	15
2.3 A produção de raios X em um tubo de raios X	16
2.3.1 O tubo de raios X	16
2.3.2 O espectro de raios X	16
2.3.3 Interação de raios X com a matéria	18
2.3.4 Coeficientes de atenuação linear de fótons	20
2.3.5 Coeficientes de transferência de energia de fótons	20

2.3.6	Fatores que influenciam a distribuição de energia de um espectro de raios X	21
2.3.7	A qualidade do feixe de raios X	22
2.4	Os detectores de telureto de cádmio	23
2.4.1	Princípio de operação dos detectores de telureto de cádmio	24
2.4.2	Coleção de cargas dos detectores de telureto de cádmio	24
2.4.3	O fator de Fano	26
2.4.4	CdTe versus CdZnTe	27
3	Materiais e métodos	29
3.1	Simulação de espectros de raios X com o Geant4	29
3.1.1	Descrição do código para a simulação	29
3.1.2	Processos físicos fornecidos pelo Geant4	30
3.2	Correção de espectros medidos com o detector CdTe	32
3.2.1	Fontes emissoras de radiação X	32
3.2.2	Sistema de espectrometria XR-100T-CdTe	33
3.2.3	Cálculo da resposta do detector CdTe	37
3.2.4	Ajuste dos parâmetros para o cálculo da resposta do detector CdTe	38
3.2.5	Reconstrução do espectro medido utilizando o método dos mínimos quadrados	43
3.3	Metodologia de comparação dos espectros	45
3.3.1	Processo de relocação de espectros multicanais	46
3.3.2	Energia média	46
3.3.3	Camada semi-redutora	47
3.3.4	Rendimento de raios X característicos	48
3.3.5	Diferença absoluta média	48
3.3.6	Espectros de referência utilizados para comparação	49
4	Análise de resultados e discussões	51

4.1	Espectros de raios X simulados com o Geant4	51
4.2	Espectros de raios X corrigidos com o auxílio do Geant4	62
5	Conclusões	73
	Referências Bibliográficas	75

Lista de Figuras

2.1	A abstração fornece somente informações relevantes do objeto, de acordo com a perspectiva do observador.(BOOCH, 1994)	10
2.2	Um objeto possui estado, comportamento e identidade única.(BOOCH, 1994) .	11
2.3	Diagrama de categoria de classes do Geant4.(CERN, 2006b)	12
2.4	Representação simplificada de um tubo de raios X e seus componentes para a produção de raios X.	16
2.5	Produção de raios X característico.	17
2.6	Diagrama do espalhamento compton.	19
2.7	Probabilidade do tipo de interação no CdTe em função da energia do fóton incidente. (LIMOUSIN, 2003)	24
2.8	Processo da formação do sinal e diagrama esquemático do detector de telureto de cádmio, com sua eletrônica associada. Os sinais típicos de saída de cada estágio são exibidos abaixo do diagrama.	25
3.1	Aparato experimental virtual da simulação da geração de raios X, a partir da interação de elétrons colidindo em um alvo de um ânodo de um tubo de raios X.	31
3.2	Aparato experimental virtual da simulação do efeito da filtração de uma distribuição de energia de fótons de raios X ou gama, para um dado ângulo sólido. .	31
3.3	Sistema de detecção XR-100T-CdTe. (AMPTEK, 2005a)	33
3.4	Diagrama de conexão do sistema XR-100T- CdTe com o amplificador PX2T e o analisador multicanal MCA 8000A. (AMPTEK, 2005a)	34
3.5	Encapsulamento do detector CdTe da Amptek modelo XR-100T-CdTe. (AMP-TEK, 2005a)	35
3.6	Princípio de funcionamento do método de discriminação de tempo de subida: (1) Sinal em tensão do pré-amplificador; (2) Sinal de carga atenuado; (3) Sinal de corrente com atraso.	35
3.7	Espectro de ^{133}Ba medido com a função RTD habilitada e desabilitada.	36

3.8	Aparato experimental virtual da simulação utilizada para cálculo da resposta do CdTe.	37
3.9	Comparação entre diferentes valores de comprimento de deslocamento de lacunas para a formação do pico de energia de 81 keV da fonte de ^{133}Ba e função RTD desabilitada. A dispersão simétrica devido ao ruído eletrônico e o fator de Fano também é mostrada no gráfico.	40
3.10	Comparação entre espectros de raios X medido e simulados para diferentes valores de espessura de detecção sensível à radiação do detector CdTe devido ao efeito do módulo eletrônico RTD. Características do espectro: tensão do tubo de 150 kVp, alvo de tungstênio com 22° , filtração de 4,0 mm de berílio, 2,5 mm de alumínio.	41
3.11	Eficiência da coleção de cargas dentro do detector CdTe utilizando a equação de Hecht com e sem a inclusão do efeito da região de transição.	43
3.12	Comparação entre espectros medido e simulados utilizando a equação de Hecht com e sem a inclusão do efeito da região de transição. Características: tensão do tubo de 70 kVp, alvo de tungstênio com 22° , filtração de 4,0 mm de berílio, 2,5 mm de alumínio.	44
4.1	Comparação entre espectros simulados com o Geant4 (modelos Low Energy e Penelope) e calculado (CRANLEY et al., 1997). Características: tensão do tubo de 25 kVp, alvo de molibdênio com 17° , filtração de 0,5 mm de berílio, 0,5 mm de alumínio e 0,03 de molibdênio.	53
4.2	Comparação entre espectros simulados com o Geant4 (modelos Low Energy e Penelope) e calculado (CRANLEY et al., 1997). Características: tensão do tubo de 30 kVp, alvo de molibdênio com 17° , filtração de 0,5 mm de berílio, 0,5 mm de alumínio e 0,03 mm de molibdênio.	54
4.3	Comparação entre espectros simulados com o Geant4 (modelos Low Energy e Penelope) e calculado (FEWELL; SHUPING, 1978). Características: tensão do tubo de 30 kVp, alvo de molibdênio com 12° , filtração de 0,5 mm de alumínio equivalente e 0,03 mm de molibdênio.	54
4.4	Comparação entre espectros simulados com o Geant4 (modelos Low Energy e Penelope) e calculado (CRANLEY et al., 1997). Características: tensão do tubo de 40 kVp, alvo de tungstênio com 22° , filtração de 4,0 mm de berílio, 2,5 mm de alumínio.	55

4.5	Comparação entre espectros simulados com o Geant4 (modelos Low Energy e Penelope) e calculado (CRANLEY et al., 1997). Características: tensão do tubo de 70 kVp, alvo de tungstênio com 22°, filtração de 4,0 mm de berílio, 2,5 mm de alumínio.	56
4.6	Comparação entre espectros simulados com o Geant4 (modelos Low Energy e Penelope) e calculado (CRANLEY et al., 1997). Características: tensão do tubo de 100 kVp, alvo de tungstênio com 22°, filtração de 4,0 mm de berílio, 2,5 mm de alumínio.	56
4.7	Comparação entre espectros simulados com o Geant4 (modelos Low Energy e Penelope) e calculado (CRANLEY et al., 1997). Características: tensão do tubo de 100 kVp, alvo de tungstênio com 22°, filtração de 4,0 mm de berílio, 4,0 mm de alumínio e 5,0 mm de cobre.	57
4.8	Comparação entre espectros simulados com o Geant4 (modelos Low Energy e Penelope) e calculado (FEWELL; SHUPING; HEALY, 1981). Características: tensão do tubo de 120 kVp, alvo de tungstênio com 20°, filtração de 2,5 mm de alumínio equivalente e 2,0 mm de alumínio.	58
4.9	Comparação entre espectros simulados com o Geant4 (modelos Low Energy e Penelope) e calculado (CRANLEY et al., 1997). Características: tensão do tubo de 150 kVp, alvo de tungstênio com 22°, filtração de 4,0 mm de berílio, 2,5 mm de alumínio.	58
4.10	Representação gráfica em 2d da resposta do detector CdTe com módulo RTD desligado.	62
4.11	Representação gráfica em 2d da resposta do detector CdTe com módulo RTD ligado.	63
4.12	Representação gráfica em 3d da resposta do detector CdTe para algumas energias de fótons incidentes no cristal e com o módulo RTD desligado.	64
4.13	Representação gráfica em 3d da resposta do detector CdTe para algumas energias de fótons incidentes no cristal e com o módulo RTD ligado.	64
4.14	Comparação entre espectro medido com o detector CdTe e o mesmo espectro após correção utilizando o Geant4 (modelo Low Energy) com o módulo RTD desligado. Características: tensão do tubo de 150 kVp, alvo de tungstênio com 22°, filtração de 4,0 mm de berílio, 2,5 mm de alumínio.	65

4.15	Comparação entre espectro medido com o detector CdTe e o mesmo espectro após correção utilizando o Geant4 (modelo Low Energy) com o módulo RTD ligado. Características: tensão do tubo de 150 kVp, alvo de tungstênio com 22°, filtração de 4,0 mm de berílio, 2,5 mm de alumínio.	66
4.16	Comparação entre espectros medidos com o detector CdTe e corrigidos utilizando o Geant4 (modelo Low Energy) com o módulo RTD ligado e desligado e espectro de referência calculado (CRANLEY et al., 1997). Características: tensão do tubo de 70 kVp, alvo de tungstênio com 22°, filtração de 4,0 mm de berílio, 2,5 mm de alumínio.	67
4.17	Comparação entre espectros medidos com o detector CdTe e corrigidos utilizando o Geant4 (modelo Low Energy) com o módulo RTD ligado e desligado e espectro de referência calculado (CRANLEY et al., 1997). Características: tensão do tubo de 100 kVp, alvo de tungstênio com 22°, filtração de 4,0 mm de berílio, 4,0 mm de alumínio e 5,0 mm de cobre.	68
4.18	Comparação entre espectros medidos com o detector CdTe e corrigidos utilizando o Geant4 (modelo Low Energy) com o módulo RTD ligado e desligado e espectro de referência calculado (CRANLEY et al., 1997). Características: tensão do tubo de 150 kVp, alvo de tungstênio com 22°, filtração de 4,0 mm de berílio, 2,5 mm de alumínio.	68

Lista de Tabelas

2.1	Comparação de algumas propriedades físicas dos detectores semicondutores CdTe, $Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te$, Si e Ge. E_{GAP} é a energia de <i>band gap</i> , ϵ_{par} é a energia necessária para a produção de um par elétron-buraco e ΔE_{intr} é a melhor resolução em energia já obtida devido à flutuação estatística da criação elétron-buraco em 100 keV.(LIMOUSIN, 2003)	23
3.1	Fontes radioativas utilizadas em calibrações.	33
4.1	Combinação de parâmetros utilizados nas simulações dos espectros de raios X com o Geant4. A distância do ponto focal do tubo até a região de interesse é de 1 m para todos os espectros. O fator de ripple é zero para todos os espectros, exceto para o da figura 4.3, que é de 6%.	52
4.2	Espectros de referências utilizados nas comparações.	52
4.3	Valores das diferenças absolutas médias entre os espectros de raios X simulados com o Geant4 (modelos físicos Low Energy e Penelope) com o seu respectivo espectro de referência.	59
4.4	Valores dos rendimentos dos raios X característicos da camada K dos espectros de raios X simulados com o Geant4 e dos espectros de referência.	59
4.5	Valores da primeira camada semi-redutora obtidos dos espectros de raios X simulados com o Geant4 e dos espectros de referência.	60
4.6	Valores da segunda camada semi-redutora obtidos dos espectros de raios X simulados com o Geant4 e dos espectros de referência.	60
4.7	Valores das energias médias dos espectros de raios X simulados com o Geant4 e dos espectros de referência. As incertezas do tipo A das energias médias dos espectros simulados com o Geant4 são menores que 0,1%.	61
4.8	Combinação de parâmetros dos espectros medidos com o detector CdTe. A distância do ponto focal do tubo até a região de interesse é de 1 m para todos os espectros.	66

4.9	Valores das diferenças absolutas médias entre cada um dos espectros corrigidos utilizando o Geant4 (modelo Low Energy) com o seu respectivo espectro de referência. Os espectros corrigidos foram medidos com o detector CdTe nas situações em que o módulo eletrônico RTD está ligado e desligado.	69
4.10	Valores dos rendimentos dos raios X característicos da camada K dos espectros medidos (módulo eletrônico RTD ligado e desligado) e corrigidos utilizando o Geant4 (modelo físico Low Energy) e os seus respectivos espectros de referência.	69
4.11	Valores da primeira camada semi-redutora obtidos dos espectros medidos com o detector CdTe e corrigidos utilizando o Geant4 (modelo Low Energy) com o módulo eletrônico RTD ligado e desligado e dos espectros de referência.	70
4.12	Valores da segunda camada semi-redutora obtidos dos espectros medidos com o detector CdTe e corrigidos utilizando o Geant4 (modelo Low Energy) com o módulo eletrônico RTD ligado e desligado e dos espectros de referência.	70
4.13	Valores das energias médias dos espectros medidos com o detector CdTe e corrigidos utilizando o Geant4 (modelo Low Energy) com o módulo eletrônico RTD ligado e desligado e dos espectros de referência. As incertezas do tipo A das energias médias dos espectros corrigidos são menores do que 0,1%.	70

1 Introdução

Atualmente, o uso da radiação ionizante é muito comum em diversas áreas da medicina, sendo largamente utilizada em radioterapia, medicina nuclear e também em radiodiagnóstico. Essas aplicações exigem conhecimentos e cuidados específicos desse tipo de radiação para ser possível maximizar os benefícios decorrentes do uso da mesma. A maioria dos arranjos experimentais encontrados nos problemas tratados em dosimetria, proteção radiológica e física médica, em que é necessário estudar a radiação ionizante, estão sujeitos a problemas inerentes e complicados. Como exemplo, temos a complexidade geométrica, a presença de diferentes materiais e até mesmo a radiação que não está dentro do foco de estudo, por ser proveniente de outros meios ou fontes indesejadas. Tais problemas geralmente são difíceis de serem resolvidos ou requerem mais investimentos para serem solucionados. Uma ferramenta que vem sendo cada vez mais utilizada para auxiliar na solução desses problemas que envolvem o uso de radiação ionizante são as simulações computacionais baseadas no método de Monte Carlo.

O método de Monte Carlo é um método estatístico de simulação numérica de problemas utilizando essencialmente uma seqüência de números aleatórios. O seu uso vem sendo cada vez mais disseminado, junto com o aumento da capacidade de processamento de dados dos computadores. Além disso, os cálculos de geração e transporte da radiação estão se tornando cada vez mais precisos, as interações da radiação com a matéria já são bem conhecidas e estão disponíveis dados de seção de choque para diversos tipos de interações. Existem diversos códigos computacionais utilizando o método de Monte Carlo, que realizam cálculos numéricos para prever e descrever as interações da radiação com a matéria. Dentre eles, destacam-se o EGS4 (NELSON; HIRAYAMA; ROGERS, 1985), MCNP (BRIESMEISTER, 2000), ITS (HALBLEIB et al., 1992), Penelope (BARÓ et al., 1995; SALVAT et al., 2001) e o Geant4 (GEometry ANd Tracking) (AGOSTINELLI et al., 2003; ALLISON et al., 2006).

Um exemplo de aplicação desse tipo de ferramenta está na radiologia diagnóstica, onde existe grande interesse na determinação precisa da quantidade de energia de radiação X depositada no paciente, para diversas situações de uso da mesma. Isto ocorre porque compreender a relação entre a quantidade de radiação recebida pelo paciente e a qualidade da imagem implica em minimizar os riscos para o paciente e otimizar a qualidade do diagnóstico. Por causa disso, é

importante para a radiologia diagnóstica a análise precisa do sistema de imagens radiográficas, incluindo o conhecimento detalhado do espectro de energia da radiação utilizada nesses tipos de exames, que compreendem a faixa de energia entre 10 keV e 150 keV (MIYAJIMA, 2003). A obtenção desse tipo de espectro só pode ser feita por meio de medidas experimentais ou de simulações computacionais.

A espectroscopia de raios X em ambientes clínicos é muito complicada devido principalmente a restrições geométricas (MIYAJIMA; IMAGAWA, 2002b) e de tempo, do custo do profissional qualificado e do equipamento necessário, geralmente disponível somente em laboratórios de pesquisa. Sistemas de detecção que empregam detectores de germânio hiperpuro (HPGe), por exemplo, possuem eficiência de detecção suficiente para raios X diagnóstico. Além disso, a alta pureza do cristal também propicia excelentes propriedades no transporte de cargas. No entanto, tais detectores possuem um alto custo e necessitam de um sistema de resfriamento criogênico, utilizando nitrogênio líquido, para reduzir o ruído térmico. Desta forma, esses sistemas se tornam muito grandes e difíceis de se manusear em um ambiente típico de um hospital. Detectores utilizando fotodiodos de silício do tipo PIN são compactos e mais baratos, porém possuem uma eficiência de detecção que vai de quase 100 % para 10keV até 1 % para 150 keV (HAMAMATSU, 1993). Portanto, seu uso é adequado apenas para a região de mamografia (KÜNZEL et al., 2004). Outra opção são os detectores de telureto de cádmio, do tipo CdTe (AMPTEK, 2005b; MIYAJIMA, 2003; MAEDAA et al., 2005) ou CdZnTe (MIYAJIMA; IMAGAWA, 2002a, 2002b), que são mais compactos que o HPGe e possuem uma excelente eficiência de detecção para toda a faixa de energia empregada em radiologia diagnóstica. Porém, a desvantagem desses detectores é a distorção do espectro devido ao armadilhamento de cargas no cristal. O custo desses detectores, tanto do CdTe, do CdZnTe e do PIN, apesar de menores que o HPGe, também não é um atrativo para hospitais de países em desenvolvimento.

Com isso, para as situações em que a obtenção do espectro experimental pode não ser possível com muita frequência, um espectro simulado pode se tornar uma opção mais conveniente. Desde a primeira tentativa de Kramer, em 1923, (KRAMER, 1923) vários grupos de pesquisa continuam trabalhando para desenvolver um método com boa exatidão para simular espectros de raios X produzidos por equipamentos de radiodiagnóstico. Como pode ser verificado através dos diversos estudos provenientes de experimentos e simulações que existem na literatura, além de medidas experimentais (FEWELL; SHUPING, 1977, 1978; FEWELL; SHUPING; HEALY, 1981), existem três categorias de métodos para simular espectros de raios X: modelos empíricos (BOONE; FEWELL; JENNINGS, 1997; BOONE; SEIBERT, 1997), semi-empíricos (BIRCH; MARSHALL; ARDRAN, 1979; BIRCH; MARSHALL, 1979; TUCKER; BARNES; CHAKRABORTY, 1991; TUCKER; BARNES; WU, 1991; BLOUGH et al., 1998; MEYER et al., 2004) e simulações utilizando os códigos computacionais baseados no método de Monte Carlo

(AY et al., 2004, 2005; MERCIER et al., 2000; NG; TANG, 2000; TÁVORA; MORTON, 1998; BHAT et al., 1998, 1999; ACOSTA et al., 2002; MAVUNDA M. ASSIAMAH; KEDDY, 2004). Métodos empíricos e semi-empíricos possuem como principal vantagem o pequeno tempo de processamento computacional. No entanto, tais métodos simulam somente alvos e filtros pré-definidos. Problemas inerentes aos diversos processos possíveis, espalhamentos múltiplos da radiação e a existência de ambientes complexos são tratados de maneira aproximada nesses métodos. Já os modelos baseados em método de Monte Carlo são capazes de produzir resultados mais realistas, possibilitando simulações com elevado detalhamento da geometria, diferentes materiais, processos físicos e partículas, apesar de ser o mais lento dos três modelos.

Uma outra finalidade para o uso de ferramentas que simulam interação da radiação com a matéria utilizando método de Monte Carlo é a possibilidade de estudo e melhor compreensão do comportamento dos detectores de radiação X e gama. No caso de detectores como o CdTe e o CdZnTe, é possível compreender melhor os efeitos de armadilhamento e de coleção das cargas no espectro medido com esses detectores. Vários estudos utilizando diferentes ferramentas computacionais e experimentais têm sido realizados para melhor compreensão e uso deste detector (OWENS et al., 2001; REDUS, 2003, 2002; REDUS et al., 2004, 2002; TAKAHASHI et al., 2002; FUNAKI et al., 1999; KOSYACHENKO; MASLYANCHUK, 2005; RATH et al., 2003; FINK et al., 2006). Tais estudos visam melhorar a qualidade dos resultados obtidos com este detector, que tem uso cada vez maior em áreas como física médica, astrofísica, células solares e até mesmo em autenticação de obras de arte (CARDOSO, 2001). O comportamento de circuitos eletrônicos presentes no sistema de detecção também podem ser simulados e estudados, como por exemplo, o discriminador de tempo de subida (REDUS, 2003), que é uma técnica que pode ser utilizada para melhorar a resolução em energia de detectores de telureto de cádmio.

No entanto, para que um código de Monte Carlo seja utilizado com confiabilidade e segurança para determinada finalidade, ele precisa ser validado sistematicamente, por meio da comparação dos dados simulados com dados de referências confiáveis. A avaliação quantitativa do acordo entre a simulação e a referência deve ser feita com o uso de métodos estatísticos, para uma rigorosa caracterização da física simulada pelo código computacional.

Desta forma, este trabalho teve como objetivo validar uma ferramenta computacional para a realização de simulações da interação de elétrons e da radiação X com a matéria, utilizando o método de Monte Carlo, para possíveis estudos em radiologia diagnóstica. Para isso, foi desenvolvido um programa computacional que simula a produção de raios X de um equipamento de raios X, com a finalidade de se obter a distribuição de energia dos fótons que alcançam uma determinada região de interesse, sem a necessidade de se fazer medidas experimentais. Outra tarefa realizada neste trabalho foi a modelagem de um detector do tipo CdTe, para possibilitar a correção de espectros medidos com esse detector em experimentos na faixa de energia de

radiodiagnóstico.

A validação do Geant4 foi realizada de modo que todos os processos físicos incluídos nas simulações agissem em conjunto com a geometria e os materiais presentes no sistema e com o acompanhamento das partículas. Em uma análise deste tipo é preciso separar da simulação os efeitos provocados pelos processos físicos daqueles causados pela geometria ou resposta do detector.

O código computacional escolhido para este trabalho foi o Geant4, que é um pacote (ou conjunto) de ferramentas computacionais para simulação da interação da radiação com a matéria, desenvolvido na linguagem de programação C++ e utilizando tecnologia de programação orientada a objetos e técnicas avançadas de engenharia de software. Por causa disso, o Geant4 possui grande potencial de expansão para aplicação em problemas específicos. A possibilidade de difundir a utilização deste pacote na área de física médica é bastante promissora (CARRIER; ARCHAMBAULT; BEAULIEU, 2004), uma vez que os desenvolvedores e colaboradores do Geant4 estão fazendo implementações no pacote que permitirão o estudo das interações da radiação com sistemas celulares e de grandes moléculas, tais como o DNA (AGOSTINELLI et al., 2003). O Geant4 tem sido também utilizado com sucesso no auxílio à solução de problemas em outras áreas da física nuclear de baixas energias, como por exemplo, em pesquisas espaciais (IVANCHENKO, 2004).

O desenvolvimento deste trabalho ocorreu em duas etapas. A primeira etapa consistiu em simular, utilizando o Geant4, espectros de energia comumente gerados por um sistema emissor de radiação X e compará-los com espectros de referência medidos e calculados. A segunda etapa foi calcular a função resposta de um detector CdTe, com o auxílio do Geant4, para que fosse possível reconstruir espectros gerados por um tubo de raios X, a partir de espectros medidos, e compará-los com espectros simulados pelo próprio Geant4 e com espectros de referência.

2 *Conceitos fundamentais*

2.1 Transporte de radiação utilizando o método de Monte Carlo

2.1.1 O método de Monte Carlo

Por definição, o método de Monte Carlo é um método estatístico de simulação numérica de problemas utilizando essencialmente uma seqüência de números aleatórios ou ainda, pseudoaleatórios. O método pode ser usado para simular o comportamento de sistemas físicos, matemáticos e também biológicos, que podem ser descritos por amostragens aleatórias de funções densidade de probabilidade (fdp). O acúmulo do(s) valor(es) observado(s) dessas amostragens produzem o resultado final da simulação.

O primeiro artigo sobre o método foi publicado em 1949 ("The Monte Carlo method") (METROPOLIS; ULAM, 1949), com os trabalhos realizados por S. Ulam, J. von Neumann, N. Metropolis, E. Fermi e outros. Apesar disso, o método de Monte Carlo já era conhecido há muito tempo, mas sua ampla aplicação somente foi possível com o surgimento dos computadores eletrônicos (DOOLEN; HENDRICKS, 1987). A partir da década de 50, uma série de códigos de transporte utilizando o método de Monte Carlo começaram a surgir (SOBOL, 1983).

O método de Monte Carlo é muito importante em física computacional e outros campos de aplicação relacionados, principalmente no estudo de sistemas de geometria complexa e nas simulações teóricas de processos físicos, como por exemplo, a interação da radiação com a matéria.

2.1.2 Descrição do processo de transporte de radiação

Na simulação do transporte de radiação utilizando o método de Monte Carlo, a história de uma partícula é definida como uma seqüência de caminhos que terminam com um evento de interação onde a partícula pode mudar sua direção de movimento, perder energia e, ocasionalmente, produzir partículas secundárias. A simulação de Monte Carlo de um dado arranjo expe-

rimental consiste de uma geração numérica de histórias. Para simular essas histórias, é preciso de modelos de interações, que geralmente são baseados em um conjunto de seções de choque diferenciais para os mecanismos de interação relevantes. As seções de choque determinam as funções densidade de probabilidade das variáveis aleatórias que caracterizam a trajetória:

1. Livre caminho entre os eventos de interação sucessivos;
2. Tipo de interação que ocorre;
3. Energia perdida e deflexão angular de um evento particular (e estado inicial das partículas secundárias emitidas, quando houver).

Uma vez conhecidas essas funções densidades de probabilidade, as histórias podem ser geradas com o uso de métodos apropriados de amostragem. Se o número de histórias geradas for grande o suficiente, informações quantitativas do processo de transporte podem ser obtidas pela simples média das histórias simuladas. Todos os resultados são influenciados por incertezas estatísticas que podem ser reduzidas com o aumento do número de histórias simuladas, e conseqüentemente, do tempo computacional. Tais incertezas também podem ser minimizadas com técnicas de redução de variância (CERN, 2006b; BROWN et al., 2003). Existem ainda as incertezas com origem nas imprecisões dos valores das seções de choque.

2.2 O código de simulação computacional Geant4

2.2.1 Introdução ao Geant4

O Geant4 (GEometry ANd Tracking) é um conjunto de ferramentas computacionais de distribuição livre que pode ser utilizado para simular a interação de partículas com a matéria (CERN, 2006b). De acordo com seus desenvolvedores, suas áreas de aplicação compreendem experimentos em física nuclear, física médica, física de partículas, aceleradores, estudos em pesquisas espaciais, astrofísica e astronomia. A faixa de energia para as simulações pode ir de 250 eV se estendendo até a ordem de 1 TeV, em algumas situações. Para levar em consideração como o sistema do experimento irá afetar o caminho das partículas, os seguintes aspectos de controle e contorno do processo de simulação das interações estão inclusos no código do programa:

- Geometria do sistema de detecção ou experimento, incluindo detectores, absorvedores, etc.,
- Materiais envolvidos,
- Partículas fundamentais de interesse,

- Geração do(s) evento(s) primário(s),
- Passagem de partículas através de materiais e campos eletromagnéticos, envolvendo possíveis interações e processos de decaimento,
- Processos físicos que regem as interações das partículas,
- Resposta dos elementos sensíveis dos detectores , isto é, a gravação de quando uma partícula passa através do volume de um detector e como um detector real se comportaria,
- Geração de dados do(s) evento(s),
- Armazenamento de eventos e trajetórias das partículas,
- Visualização do detector e das trajetórias das partículas, e
- Coleta e análise dos dados da simulação em diferentes níveis de detalhe e refinamento.

A inclusão de tais aspectos significa que menos tempo será despendido no desenvolvimento de códigos que são comuns à maioria das simulações de interação da radiação com a matéria. Além disso, o pacote também fornece suporte desde a definição inicial do problema até a produção de resultados e gráficos para divulgação. Para esta finalidade, o pacote possui:

- Interface de usuário,
- Rotinas dirigidas, e
- Interpretadores de comandos que operam em cada nível da simulação.

O código do programa é escrito utilizando a linguagem de programação C++ e é o primeiro em sua categoria a explorar técnicas de engenharia de software e tecnologia orientada a objetos. Tais conceitos são importantes para o gerenciamento da complexidade do código e dos limites das dependências de cada parte do mesmo, ao se definir uma interface uniforme para o desenvolvedor e com princípios de organização de código comuns para todos os modelos físicos. A implementação de novos modelos físicos e a compreensão dos já existentes são facilitadas, pois com esses conceitos pouca ou nenhuma modificação no código original é necessária.

2.2.2 História do Geant4

A idéia surgiu inicialmente em dois estudos separados realizados no CERN (Centre Européenne pour la Recherche Nucléaire) e KEK (sigla japonesa que significa High Energy Accelerator Research Organization) em 1993. Os dois grupos imaginavam uma maneira de aperfeiçoar o programa de simulação Geant3, produzido na década de 70 utilizando a linguagem FORTRAN. Assim, foi feita uma união de esforços para se construir um programa de simulação de detectores totalmente novo baseado na tecnologia de orientação de objetos. O objetivo

inicial era que o programa atendesse os requisitos da próxima geração de experimentos de física de altas energias, mas rapidamente se estendeu para as comunidades de física nuclear, de aceleradores, espacial e médica.

A iniciativa se tornou uma colaboração internacional de físicos programadores e engenheiros de software de um grande número de instituições e universidades da Europa, Canadá, Japão e Estados Unidos. A primeira versão do produto foi lançada em dezembro de 1998. A partir desse momento o pacote de programas passou a ser chamado de Geant4.

Atualmente o Geant4 - considerando-se tamanho de código, objetivo pretendido e número de contribuintes - pode representar um dos maiores e mais ambiciosos projetos fora do mundo corporativo. Cada parte do programa Geant4 é gerenciado por um grupo de trabalho, liderado por um coordenador responsável. Do mesmo modo, existem grupos de trabalho para cada uma das seguintes atividades: testes e garantia da qualidade, gerenciamento de software e documentação. Portanto, cada pergunta da comunidade externa pode ser endereçada ao especialista do assunto.

2.2.3 Aspectos técnicos do Geant4

Conceitos de Engenharia de Software

A engenharia de software é uma integração de métodos, ferramentas e procedimentos - baseados em princípios de engenharia - para o desenvolvimento de softwares confiáveis, eficientes e economicamente viáveis (PRESSMAN, 2002). Na engenharia de software existem fases fundamentais no processo de criação de um software, sendo que a maioria não envolve a produção direta do software, isto é, a codificação.

A etapa inicial na criação de um software é definir seu escopo e realizar seu detalhamento, ou seja, as informações a serem processadas, funções e desempenhos esperados, restrições existentes no projeto e critérios para validação do sistema. Essa etapa de definição envolve:

- a análise do sistema, onde é definido o escopo do software e o papel de cada parte de um sistema baseado em computador;
- o planejamento do projeto de software analisa os riscos, recursos alocados e custos estimados para a situação proposta. As tarefas e a programação de trabalho são também definidas;
- a análise de requisitos realiza um detalhamento do escopo do software, inclusive suas funções.

A fase seguinte define como deve ser a estrutura de dados e a arquitetura do software, além da tradução do projeto para uma linguagem de computador e os testes a serem realizados. As

etapas pertencentes a essa fase de desenvolvimento são:

- o projeto do software, que é a interpretação dos requisitos do software utilizando representações (como gráficos, tabelas ou fluxogramas) que descrevem a estrutura de dados, arquitetura do software e as características da interface;

- a codificação é a conversão das representações dos projetos em uma linguagem de computação;

- os testes de software têm por finalidade descobrir defeitos de função, lógica e implementação. Eles representam elementos cruciais da garantia da qualidade de um software.

Todas essas etapas levam à validação do produto de software, ou seja, garantem que o sistema é estável e que produz os resultados esperados.

Uma outra tarefa muito importante é a documentação de todas as etapas envolvidas no processo de criação de um software. Isso tem o propósito de facilitar futuras manutenções e aperfeiçoamentos no sistema.

A etapa de manutenção refaz o caminho das duas fases anteriores, mas levando em conta um software já existente. Três tipos de mudança podem ocorrer:

- a correção de problemas apresentados pelo software;
- a adaptação do software devido alterações de ambiente e;
- a otimização funcional do software.

A utilização dessas técnicas, no caso do Geant4, proporciona o desenvolvimento de um software extremamente complexo com custos bem estimados e esforços de cada grupo de trabalho da colaboração mundial distribuídos de modo planejado. Além disso, a garantia da qualidade e uma boa documentação do produto implicam em um software confiável e eficiente. Tudo isso vem caminhando para uma validação do Geant4 em diferentes aplicações e áreas da física.

Conceitos e princípios orientados a objetos

Uma abordagem amplamente usada para a solução de problemas complexos adota um ponto de vista orientado a objetos. Nesta abordagem, o domínio do problema é caracterizado como um conjunto de objetos que têm propriedades (atributos) e comportamentos (métodos) específicos. Um conceito importante para a orientação a objetos é a abstração, que permite fornecer somente aspectos essenciais de um certo objeto (figura 2.1). O grau de abstração de um programa orientado a objetos é mais elevado do que o de uma linguagem estruturada, onde o programa é dividido em funções e módulos.

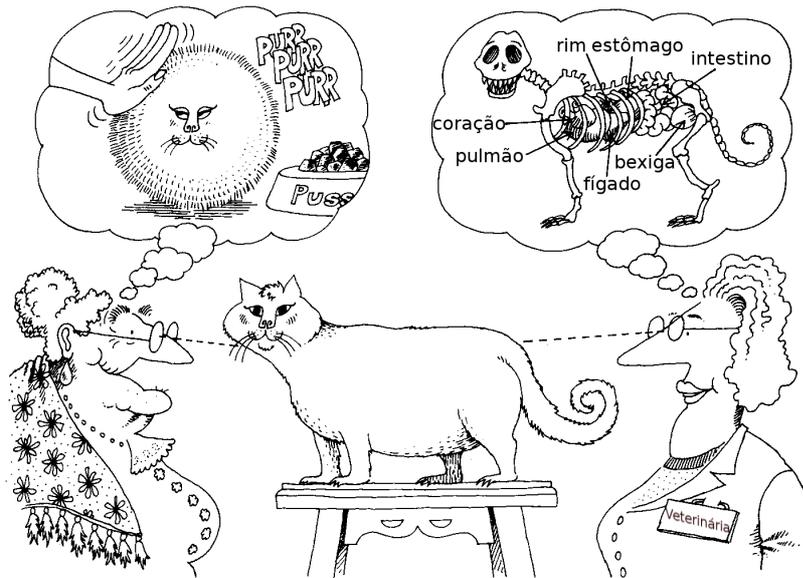


Figura 2.1: A abstração fornece somente informações relevantes do objeto, de acordo com a perspectiva do observador.(BOOCH, 1994)

A orientação a objetos permite representar o comportamento do mundo real de um modo que oculta detalhes de implementação dos objetos, utilizando uma técnica denominada encapsulamento. Portanto, os objetos encapsulam dados e funções que manipulam esses dados. Isto torna possível uma concentração maior nos aspectos principais do problema, segundo a perspectiva de um observador.

Um objeto é uma entidade que combina identidade, estado e comportamento (figura 2.2). Identidade é a propriedade que distingue um objeto de todos os outros. O estado de um objeto engloba todas as (geralmente estáticas) propriedades do objeto com os (geralmente dinâmicos) valores de cada uma dessas propriedades. O comportamento de um objeto é determinado pelos métodos, isto é, rotinas que são executadas pelo objeto através do recebimento de mensagens. Uma mensagem é a chamada de um método. Os objetos comunicam-se uns com os outros através dessas mensagens. Por isso, cada mensagem é o pedido enviado a um objeto, a fim de que ele desempenhe alguma operação. Uma operação (ou método) é uma ação que um objeto executa sobre outro para se produzir uma reação. Existe uma analogia entre o método da linguagem orientada a objetos com a função da linguagem estruturada. Portanto, o comportamento define a ação e a reação do objeto em termos de sua mudança de estado e transferência de mensagens. Os resultados acumulados do comportamento de um objeto irão definir o seu estado.

Os objetos são divididos em classes e subclasses. As classes são descrições generalizadas que descrevem uma coleção de objetos similares no domínio do sistema de software. Uma classe descreve um conjunto de objetos com as mesmas propriedades (atributos), o mesmo comportamento (operações), os mesmos relacionamentos com outros objetos e a mesma semântica. A modelagem orientada a objetos consiste, basicamente, na definição de classes. O compor-

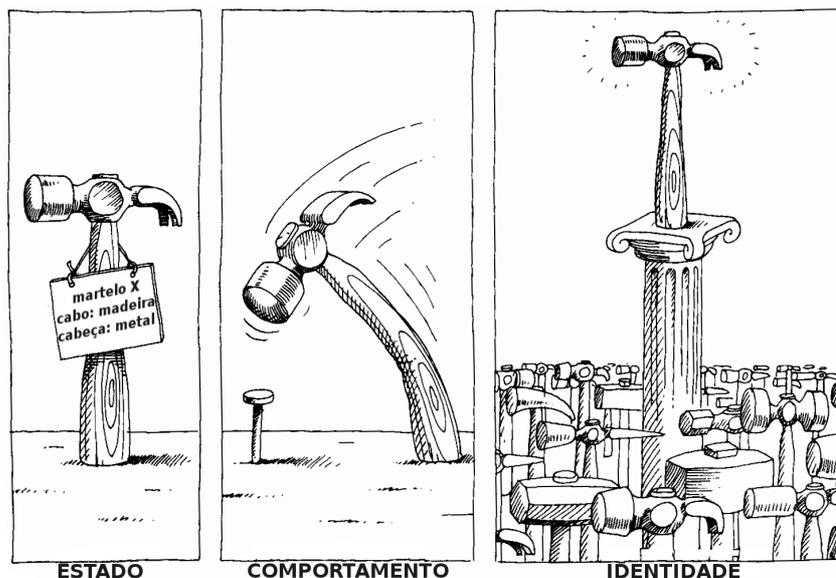


Figura 2.2: Um objeto possui estado, comportamento e identidade única.(BOOCH, 1994)

tamento e a estrutura de informação de uma instância (concretização) são definidos pela sua classe. Objetos com propriedades e comportamento idênticos são descritos como instâncias de uma mesma classe. A superclasse é uma coleção de classes. A subclasse é uma instância de uma classe. Uma categoria de classe contém classes que possuem um relacionamento próximo entre si e são usadas para criar unidades lógicas. Portanto, os relacionamentos entre classes que pertencem a outra categoria de classe são fracos. As categorias de classe e suas relações podem ser representados por um diagrama de categoria de classe.

Vários mecanismos de estruturação de classes têm sido propostos (BOOCH, 1994). Um mecanismo muito importante para se definir classes é a herança. A herança é um relacionamento que permite que subclasses reutilizem dados e operações de uma superclasse, definindo uma hierarquia de classes. Polimorfismo é um outro mecanismo que permite que vários objetos em uma herança de classes tenham diferentes métodos com o mesmo nome.

Os conceitos e princípios orientados a objetos tornam a criação de software muito mais intuitiva, pois é possível solucionar problemas em termos de objetos, os quais estão diretamente associados às entidades reais. O software orientado a objetos é mais maleável, fácil de organizar, de manter organizado e pode ser desenvolvido em paralelo sem grandes complicações. A modificação e expansão do software também se tornam mais simples com uma das principais virtudes da tecnologia orientada a objetos, chamada de reuso, que torna o desenvolvimento de software mais rápido e com aumento de qualidade. Para grandes sistemas de software essa tecnologia se torna ainda mais essencial.

2.2.4 Projeto e arquitetura

As categorias de classes do Geant4 e seus relacionamentos entre elas são exibidas no diagrama de categoria de classe da figura 2.3. Esse tipo de diagrama é muito útil para mostrar a funcionalidade do código. Uma descrição de cada categoria de classe é feita no manual do Geant4(CERN, 2006b). Cada caixa na figura representa uma categoria de classe. As linhas representam relações de uso. As categorias de classe que possuem o círculo numa extremidade da linha usam a outra categoria que está na outra extremidade. Como exemplo, temos que a categoria de classe *Material* é usada pelas categorias de classe *Geometry* e *Particle*.

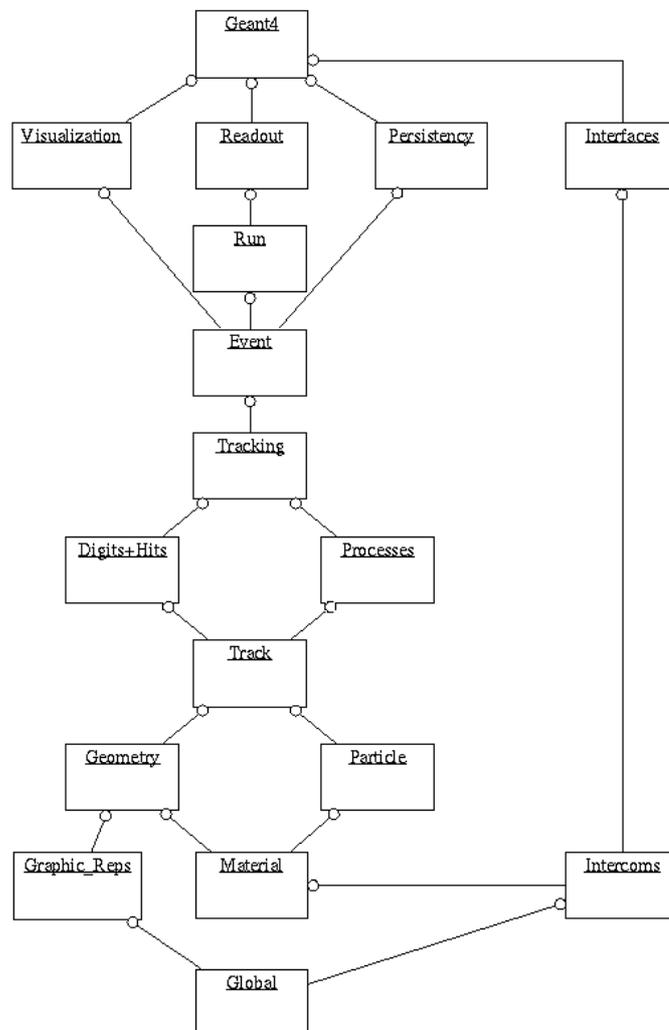


Figura 2.3: Diagrama de categoria de classes do Geant4.(CERN, 2006b)

É interessante ressaltar que a organização dos arquivos do código do Geant4 e de seu manual de usuário (CERN, 2006b) é feita de acordo com estas categorias de classe.

2.2.5 Os modelos físicos eletromagnéticos do Geant4

Com a ferramenta Geant4, o usuário é capaz de simular uma grande variedade de processos físicos eletromagnéticos, incluindo simulações com elétrons, pósitrons, fótons, hádrons e interações óticas (CERN, 2006a). No caso de elétrons e fótons, três modelos podem ser empregados: Standard, Low Energy e Penelope. Tais modelos são baseados em modelos teóricos e adotam diferentes bases de dados de seções de choque e algoritmos de amostragem de estado final.

Uma outra possibilidade de uso do código é a seleção de processos de diferentes modelos para uma única simulação, com exceção dos processos de ionização e *bremsstrahlung* de elétrons, que sempre devem ser escolhidos do mesmo modelo (POON; VERHAEGEN, 2005). Um caso comum é o espalhamento múltiplo de elétrons (URBÁN, 2002), que está implementado somente no modelo Standard, mas é adequado para simulações nas faixas de energias compreendidas pelos três modelos.

O modelo físico Standard

O modelo Standard pode ser usado para energias no intervalo de 1 keV até 100 TeV. As interações com fótons incluídas são espalhamento Compton, produção de pares de elétrons e múons e efeito fotoelétrico. Os processos para elétrons e pósitrons compreendem *bremsstrahlung*, ionização e produção de raios delta, aniquilação de pósitrons e radiação síncrotron. Não estão inclusos o espalhamento Rayleigh, pois o modelo considera que o núcleo atômico é fixo, ou seja, o momento de recuo do núcleo é desprezado, e a relaxação atômica, já que os elétrons são considerados "quasi-livres", ou seja, no caso do efeito fotoelétrico, a energia de ligação do elétron com o átomo é desprezada.

O modelo emprega algoritmos de transporte mais simples em relação aos outros modelos, o que o torna mais eficiente no tempo de processamento computacional. Esquemas de parametrização otimizados para física de altas energias são utilizados para as seções de choque.

O modelo físico Low Energy

Os processos eletromagnéticos Low Energy foram adicionados com a finalidade de estender a validade das interações das partículas para faixas de energias menores do que os processos eletromagnéticos do modelo físico Standard. Atualmente, os processos físicos presentes no modelo Low Energy são válidos para a faixa de energia que pode ir de 250 eV e chegar até aproximadamente 100 GeV. (CERN, 2006b) O modelo Low Energy faz uso direto dos dados das seções de choque para as camadas eletrônicas dos elementos cujo número atômico pode ir

de 1 até 99.

Os seguintes processos estão inclusos na extensão Low Energy: efeito fotoelétrico, espalhamento Compton, espalhamento Rayleigh, conversão gama (produção de pares), *bremsstrahlung* e ionização. O processo de relaxação atômica, isto é, a desexcitação do átomo depois da criação de uma vacância por um processo primário, também está implementado. No modelo Low Energy, essa desexcitação pode ocorrer por meio de fluorescência ou de efeito Auger para os processos primários de ionização e efeito fotoelétrico. As fases envolvidas em cada processo incluem o cálculo e o uso das seções de choque total e a geração do estado final.

A abordagem do modelo Low Energy adota um conjunto de base de dados distribuídas publicamente (CULLEN; HUBBELL; KISSEL, 1997; PERKINS; CULLEN; SELTZER, 1997; PERKINS et al., 1997), que fornecem dados para o cálculo das seções de choque e amostragem do estado final para a modelagem da interação de fótons e elétrons com a matéria. Essas bases de dados são responsáveis por fornecerem as seguintes informações para as simulações:

- seções de choque total para efeito fotoelétrico, espalhamento Compton e Rayleigh, produção de pares e *bremsstrahlung*,
- seções de choque de subcamadas para efeito fotoelétrico e ionização,
- funções de espalhamento para efeito Compton,
- fatores de forma para espalhamento Rayleigh,
- energias de ligação para elétrons para todas as subcamadas,
- probabilidades de transição entre subcamadas para os efeitos Auger e de fluorescência e
- tabelas de stopping power.

O modelo físico Penelope

O modelo físico Penelope (PENetration and Energy LOSS of Positrons and Electrons) se baseia no código computacional Penelope (versão 2001)(SALVAT et al., 2001), desenvolvido em FORTRAN77 especialmente para simulações de processos de transporte de radiação utilizando o método de Monte Carlo. Esse modelo físico foi incluído no pacote Geant4 como uma alternativa independente ao modelo físico Low Energy. A sua implementação tem especial atenção para a descrição do transporte e interação de fótons e elétrons na faixa de energia que vai de 100 eV até 1 GeV, incluindo efeitos atômicos. Podem ser simulados efeito fotoelétrico seguido de relaxação, espalhamento Compton, espalhamento Rayleigh, interações de ionização, *bremsstrahlung*, conversão gama e aniquilação de pares. O processo de espalhamento Compton oferece duas vantagens neste modelo em relação ao Low Energy: deslocamento Doppler e

relaxação atômica resultante da vacância gerada pelo espalhamento primário.

Os processos são baseados numa abordagem que combina base de dados experimentais com modelos de seções de choque analíticas para diferentes mecanismos de interação. As seções de choque utilizadas pelo modelo físico Penelope são baseadas na LLNL (sigla de Lawrence Livermore National Laboratory) EPDL97 (CULLEN; HUBBELL; KISSEL, 1997).

2.2.6 Cortes de passagem e limites de produção de partículas

Em códigos de transporte de radiação que utilizam o método de Monte Carlo, o transporte de uma partícula é realizado até que sua energia cinética seja zero. Em muitas simulações, isso gera um processamento de máquina desnecessário dependendo da faixa de energia de interesse do estudo. Para se evitar isso, uma solução adotada por muitos códigos é o corte de passagem de partículas, onde o transporte de uma determinada partícula é interrompido quando a partícula alcança um certo valor de energia em um determinado local da simulação, sendo que essa energia restante acaba por ser depositada nesse mesmo ponto.

O corte padrão no Geant4 não é um corte de passagem de partículas, mas sim um limite de produção de partículas secundárias, que só se aplica para processos que possuem divergência no infravermelho (CERN, 2006b). Esse corte, definido pelo método *SetCut()*, é dado em unidades de distância, que é convertida para energia para todos os materiais presentes na simulação. Para o processo de decaimento radioativo, por exemplo, esse limite não se aplica. Antes de iniciar uma simulação, o usuário deve determinar os limites de produção de energia para fótons, elétrons e pósitrons. Abaixo desse limite, a energia correspondente à partícula secundária é depositada localmente. As exceções para isso ocorrem quando o programa verifica que existe a possibilidade de uma partícula secundária alcançar um detector, ou ainda, no caso de conversão gama, quando o pósitron é sempre produzido para futura aniquilação.

O limite de produção também pode ser determinado em termos de distância mínima que ainda resta a ser percorrida pela partícula. Esse alcance de parada é útil quando se deseja que a energia seja liberada numa determinada posição espacial. Já os limites de produção em energia implicam em deposição de energia em distâncias que dependem do material. O Geant4 também possibilita determinar diferentes limites de produção para diferentes regiões do sistema do experimento. O corte de passagem de partículas propriamente dito, em termos de energia ou distância, também pode ser feito através de uma classe denominada *G4UserSpecialCuts* (POON; SEUNTJENS; VERHAEGEN, 2005). Além disso, também é possível escolher um tamanho de passo máximo para qualquer volume simulado, em termos de distância percorrida ou energia perdida, utilizando a classe *G4UserLimits*.

2.3 A produção de raios X em um tubo de raios X

2.3.1 O tubo de raios X

A figura 2.4 apresenta o esquema de um tubo de raios X, que é um tubo de vidro em vácuo com dois eletrodos e é parte integrante de um equipamento de raios X. A aplicação de uma tensão VF no filamento de tungstênio do cátodo produz uma corrente que, por emissão termoiônica, emite elétrons que são acelerados pela diferença de potencial V até atingirem o alvo do ânodo, o qual geralmente é composto de molibdênio, tungstênio e/ou rênio. A colisão desses elétrons no alvo gera a emissão de raios X na forma de radiação de *bremsstrahlung* e característica.

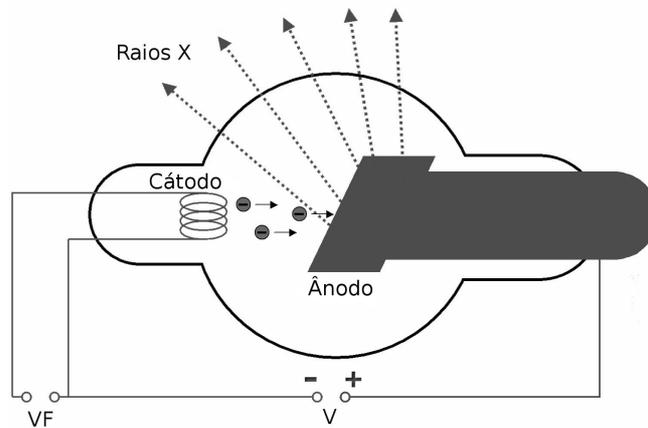


Figura 2.4: Representação simplificada de um tubo de raios X e seus componentes para a produção de raios X.

Durante o tempo de aplicação de carga do tubo, o alvo é constantemente bombardeado por elétrons, sendo que apenas cerca de 1% da energia dos elétrons que colidem no alvo produz raios X. Logo, 99% dessa energia é dissipada na forma de energia térmica. Por isso, é importante que o material que constitui o alvo tenha alto ponto de fusão e também seja resfriado, eventualmente, com a circulação de óleo isolante.

2.3.2 O espectro de raios X

Bremsstrahlung

O efeito de *bremsstrahlung*, ou radiação de freamento, produz o tipo de radiação X responsável pela parte contínua do espectro de energia gerado por um equipamento de raios X. Ela ocorre com a perda de energia cinética dos elétrons acelerados emitidos pelo cátodo, que ao serem desacelerados pela interação coulombiana com os núcleos dos átomos presentes no alvo do ânodo, compensam essa perda com a emissão de radiação eletromagnética. Devido às

variações nos parâmetros de impacto dos elétrons com os átomos do alvo, as interações ocorrem com diferentes intensidades, o que gera um amplo espectro de radiação, com diferentes comprimentos de onda, e que depende da energia cinética do elétron incidente e do número atômico do material do alvo.

Radiação X característica

O processo de geração dos raios X característicos a partir de um elétron proveniente do cátodo é representado na figura 2.5. Quando um elétron emitido pelo cátodo interage com um outro elétron presente em uma das camadas orbitais de um dos átomos do alvo do ânodo, ele pode retirar esse elétron da sua órbita, num processo chamado de ionização, e fazer com que um outro elétron de uma camada mais externa seja transferido para uma camada mais próxima ao núcleo. Essa transição de níveis de energia do elétron provoca a emissão de um fóton de raios X característico do elemento, cuja energia é determinada pela diferença entre os níveis de energia atômicos envolvidos. Esse processo de emissão do fóton de raios X também é chamado de fluorescência. Uma condição essencial para que ocorra a produção de raios X característico é que a energia cinética do elétron incidente no alvo seja maior que a energia de ligação específica do elemento constituinte do material do alvo. Quando as vacâncias são produzidas no nível de energia $n=1$, ou camada K do átomo, e são preenchidas por elétrons do nível de energia $n=2$, ou camada L, são emitidos raios X característicos chamados de K-alfa, e aqueles provenientes da transição $n=3$ para $n=1$ são chamados de K-beta. Para as transições do nível de energia $n=3$ para o $n=2$, os raios X são chamados de L-alfa e de $n=4$ para $n=2$ são os L-beta, e assim sucessivamente.

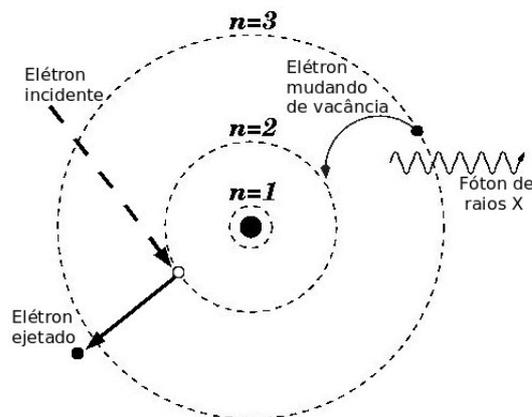


Figura 2.5: Produção de raios X característico.

Em vez da emissão de um fóton de raios X característico, outra situação provável para que o átomo retorne para sua condição estável é a transferência da energia de excitação do

átomo diretamente para um elétron de uma camada mais externa, fazendo com que esse elétron, chamado de elétron Auger, seja ejetado do átomo. Esse tipo de emissão compete diretamente com a fluorescência, porém essa transição é mais provável de ocorrer para energias de ligação atômica abaixo de 2 keV.

2.3.3 Interação de raios X com a matéria

A interação dos fótons de raios X com a matéria se dá por meio de processos que alteram a direção e/ou energia dos mesmos. Tais processos são os efeitos denominados fotoelétrico, espalhamento Compton ou incoerente e espalhamento Rayleigh ou coerente.

Efeito fotoelétrico

O efeito fotoelétrico ocorre quando um fóton interage com um átomo e remove um elétron, chamado também de fotoelétron, desse átomo. A energia mínima necessária do fóton para retirar esse elétron é a energia de ligação atômica do elétron correspondente ao nível de energia ocupado pelo elétron no átomo. O restante da energia do fóton é transformado em energia cinética do elétron e do átomo. A equação 2.1 descreve esse processo:

$$h\nu = T_e + T_a + B_e \quad (2.1)$$

onde h é a constante de Planck, ν é a frequência do fóton incidente, T_e é a energia cinética do elétron removido do átomo, T_a é a energia cinética do átomo e B_e é a energia de ligação atômica do elétron. Em geral, é possível desprezar a energia cinética do átomo na conservação de energia, pois a massa dos átomos é muito maior que a do elétron. No entanto, a massa do átomo é essencial para a conservação do momento desse processo:

$$\vec{p}_\nu = \vec{p}_e + \vec{p}_a \quad (2.2)$$

onde \vec{p}_ν é o momento do fóton, \vec{p}_e é o momento do elétron e \vec{p}_a é o momento do átomo.

Espalhamento Compton

No modelo simplificado, o espalhamento Compton (ou incoerente) ocorre quando um fóton com determinado comprimento de onda interage com um elétron livre, provocando uma transferência de energia cinética ao elétron, que é deslocado por um ângulo ϕ , como mostra a figura 2.6. Esse efeito também desloca o fóton por um certo ângulo θ em relação ao ponto de onde

ocorre a interação.

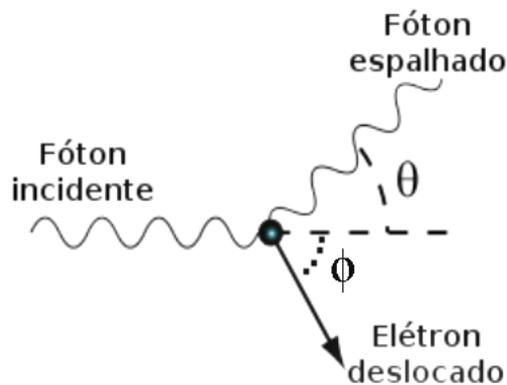


Figura 2.6: Diagrama do espalhamento Compton.

A equação de conservação de energia desse processo é dada por:

$$h\nu_i = h\nu_f + T_e \quad (2.3)$$

onde h é a constante de Planck, ν_i é a frequência do fóton incidente, ν_f é a frequência do fóton espalhado e T_e é a energia cinética do elétron após a colisão. As equações que definem a conservação do momento são:

$$\frac{h\nu_f}{c} \text{sen}(\theta) = p_e \text{sen}(\phi) \quad (2.4)$$

$$\frac{h\nu_i}{c} = p_e \text{cos}(\phi) + \frac{h\nu_f}{c} \text{cos}(\theta) \quad (2.5)$$

onde c é a velocidade da luz e p_e é o momento linear do elétron. O comprimento de onda do fóton espalhado é dado pela equação:

$$\lambda_f = \frac{h}{m_e c} (1 - \text{cos}\theta) + \lambda_i \quad (2.6)$$

onde m_e é a massa de repouso do elétron e λ_i é o comprimento de onda do fóton incidente.

Espalhamento Rayleigh

O espalhamento Rayleigh (ou coerente) ocorre com a absorção de um fóton incidente em um átomo e a sua reemissão em uma direção diferente, com um pequeno recuo do átomo, para garantir a conservação do momento. Esse processo ocorre devido à interação do fóton com o átomo como um todo, sem a transferência de energia do fóton para o átomo.

2.3.4 Coeficientes de atenuação linear de fótons

As probabilidades dos processos físicos acima descritos ocorrerem são independentes entre si e podem ser expressas em termos de seus respectivos coeficientes de atenuação linear, que dependem da energia do fóton e do material com que o mesmo interage. A soma total deles é a probabilidade total de interação dada pelo coeficiente de atenuação linear total:

$$\mu = \tau + \sigma_c + \sigma_r \quad (2.7)$$

onde τ , σ_c e σ_r são os coeficientes de atenuação linear para efeito fotoelétrico, espalhamento Compton e Rayleigh, respectivamente. Para materiais de baixo número atômico, o espalhamento Rayleigh é geralmente desprezível para energias acima de 10 keV (JOHNS; CUNNINGHAM, 1983).

Quando um feixe de fótons monoenergético interage em um material de espessura conhecida, a quantidade de fótons que atravessa o material sem interagir com o mesmo é dada pela lei de atenuação exponencial:

$$I = I_0 \cdot e^{-\mu x} \quad (2.8)$$

onde I_0 é a intensidade do feixe inicial e x é a espessura do material.

2.3.5 Coeficientes de transferência de energia de fótons

A probabilidade de um fóton transferir energia ao meio por um determinado processo físico de interação é definida pelo coeficiente de transferência de energia, o qual depende da energia do fóton e do material. A probabilidade total de transferência de energia é o coeficiente de transferência de energia dado por:

$$\mu_{tr} = \tau_{tr} + \sigma_{tr} \quad (2.9)$$

onde τ_{tr} , σ_{tr} são os coeficientes de transferência de energia por efeito fotoelétrico e espalhamento Compton, respectivamente. O espalhamento Rayleigh não transfere energia ao meio em nenhuma situação.

Kerma

Um parâmetro utilizado para representar a transferência de energia ao meio por um feixe de raios X é o kerma (ICRU, 1998), que é definido como a soma das energias cinéticas iniciais de todas as partículas carregadas liberadas por radiações ionizantes não-carregadas em um determinado volume, dividida pela massa desse volume. A unidade de kerma é J/kg ou Gray. O kerma no ar para um feixe de raios X homogêneo com espectro discreto de N canais de energia é dado por:

$$K_{ar} = \phi \sum_{i=1}^N C_i \cdot E_i \cdot \left(\frac{\mu_{tr}}{\rho} \right)_{ar, E_i} \quad (2.10)$$

onde ϕ é a fluência de fótons do feixe, C_i é a frequência de ocorrência de fótons com energia E_i e $\left(\frac{\mu_{tr}}{\rho} \right)_{ar, E_i}$ é o coeficiente de transferência de energia por massa de ar para fótons de energia E_i .

2.3.6 Fatores que influenciam a distribuição de energia de um espectro de raios X

Existem alguns fatores que alteram a distribuição de energia de um espectro de raios X gerado por um tubo de raios X. Um deles é a diferença de potencial V aplicada ao tubo, que determina a máxima energia dos elétrons que incidem no alvo do ânodo, que por sua vez, determina a máxima energia dos fótons de raios X que são produzidos pelo tubo. Desta forma, qualquer variação na tensão aplicada no tubo de raios X influencia diretamente na produção da radiação X. Essa variação geralmente é quantificada pelo fator de *ripple* (JOHNS; CUNNINGHAM, 1983), que é definido como a porcentagem de variação da tensão de pico aplicada ao tubo de raios X.

O material constituinte do alvo influencia nos valores das energias dos fótons dos picos de radiação característica observados no espectro de raios X e na fluência de fótons de bremsstrahlung. Já o ângulo de inclinação do ânodo contribui na atenuação do feixe de raios X na região de baixas energias do espectro. Desta forma, um ângulo de inclinação pequeno do ânodo irá absorver mais fótons de raios X do que um ângulo de inclinação maior. O ângulo do ânodo também influencia no efeito *heel* (JOHNS; CUNNINGHAM, 1983), que é o efeito responsável pela variação da intensidade da radiação X ao longo da direção cátodo-ânodo no campo de radiação.

O uso de filtros de atenuação onde um feixe de raios X incide também altera a distribuição das intensidades de energia dos fótons de raios X desse feixe, sendo que a atenuação do feixe

de raios X depende dos materiais constituintes e da espessura dos filtros utilizados.

2.3.7 A qualidade do feixe de raios X

A qualidade do feixe de raios X se refere à capacidade de penetração do mesmo. Uma completa especificação da qualidade requer o conhecimento da distribuição de energia do feixe de raios X. No entanto, quando isso não é possível, a qualidade da radiação também pode ser expressa em termos de uma grandeza chamada camada semi-redutora (ISO, 1996).

A camada semi-redutora é a espessura de um material específico que atenua o feixe de radiação de forma que a taxa de kerma no ar é reduzida à metade de seu valor inicial.

A partir das equações 2.10 e 2.8, é possível determinar o kerma do feixe atenuado, que é dado por:

$$K_{ar}^{aten} = \phi \sum_{i=1}^N C_i \cdot E_i \cdot e^{-\mu_i x} \cdot \left(\frac{\mu_{tr}}{\rho} \right)_{ar, E_i} \quad (2.11)$$

onde μ_{E_i} é o coeficiente de atenuação do material atenuador para a energia E_i .

Na situação em que a razão entre as equações 2.11 e 2.10 é igual a 1/2, o valor x_{CSR} será o valor da camada semi-redutora:

$$\frac{K_{ar}^{aten}}{K_{ar}^{orig}} = \frac{1}{2} = \frac{\phi \sum_{i=1}^N C_i \cdot E_i \cdot \exp(-\mu_i x_{CSR}) \cdot \left(\frac{\mu_{tr}}{\rho} \right)_{ar, E_i}}{\phi \sum_{i=1}^N C_i \cdot E_i \cdot \left(\frac{\mu_{tr}}{\rho} \right)_{ar, E_i}} = \frac{\sum_{i=1}^N C_i \cdot E_i \cdot \exp(-\mu_i x_{CSR}) \cdot \left(\frac{\mu_{tr}}{\rho} \right)_{ar, E_i}}{\sum_{i=1}^N C_i \cdot E_i \cdot \left(\frac{\mu_{tr}}{\rho} \right)_{ar, E_i}} \quad (2.12)$$

Para o cálculo da camada semiredutora de um feixe de raios X monoenergético, a equação 2.12 pode ser simplificada para:

$$x_{CSR} = \frac{\ln(2)}{\mu_E} \quad (2.13)$$

onde μ_E é o coeficiente de atenuação total para fótons com energia E. Para o caso de um feixe de raios X que não seja monoenergético, a energia E corresponde à energia equivalente do espectro de energia. Assim, em uma situação prática a lei de atenuação exponencial é dada por:

$$I = I_0 \cdot e^{-\mu x} = I_0 \cdot e^{-\frac{\ln(2)}{x_{CSR}} x} \quad (2.14)$$

2.4 Os detectores de telureto de cádmio

Muitos materiais têm sido estudados para o desenvolvimento de detectores de radiação X e gama que combinam alto coeficiente de absorção, boa resolução em energia e praticidade. Cintiladores inorgânicos acoplados a fotodiodos ou tubos fotomultiplicadores geralmente oferecem alto coeficiente de absorção, devido ao seu grande tamanho, alto número atômico e densidade dos cristais disponíveis. No entanto, tais detectores possuem pequena resolução em energia. Dispositivos semicondutores, como silício (Si) ou germânio (Ge), possuem uma excelente resolução energética. Apesar disso, o silício oferece um pequeno coeficiente de absorção para fótons de energia acima de 100 keV, limitando seu uso somente para faixas de energias mais baixas. Os detectores de germânio requerem temperaturas criogênicas para operar, pois a energia necessária para romper a ligação entre um elétron e um átomo da rede que forma o material, chamada de energia de *band gap*, é muito pequena. Por esses motivos, semicondutores com alta densidade, alto número atômico e energia de *band gap* maior do que a do silício e a do germânio têm sido estudados desde o início da década de 70 (LIMOUSIN, 2003). A tabela 2.1 apresenta uma comparação entre o silício, germânio, telureto de cádmio (CdTe) e telureto de cádmio e zinco ($Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te$), sendo que esses dois últimos são materiais baseados em telureto de cádmio que oferecem a oportunidade de combinar excelentes resoluções em energia em um sistema de detecção de raios X e gama sem necessitar de sistemas de criogenia.

Tabela 2.1: Comparação de algumas propriedades físicas dos detectores semicondutores CdTe, $Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te$, Si e Ge. E_{GAP} é a energia de *band gap*, ϵ_{par} é a energia necessária para a produção de um par elétron-buraco e ΔE_{intr} é a melhor resolução em energia já obtida devido à flutuação estatística da criação elétron-buraco em 100 keV. (LIMOUSIN, 2003)

Semicondutor	Densidade (g/cm^3)	Número Atômico	E_{GAP} (eV)	ϵ_{par} (eV/par)	ΔE_{intr} (eV) em 100 keV
Si	2,33	14	1,12	3,6	450
Ge	5,33	32	0,67	2,9	400
CdTe	5,85	48;52	1,44	4,43	700
$Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te$	5,81	48;30;52	1,6	4,6	620

O detectores baseados em telureto de cádmio apresentam alta eficiência para detecção de fótons na faixa de energia de 10 keV até 500 keV (LIMOUSIN, 2003). Os números atômicos do cádmio ($Z_{Cd} = 48$) e do telúrio ($Z_{Te} = 52$) proporcionam uma probabilidade de absorção predominante por efeito fotoelétrico para até cerca de 300 keV quando em comparação com o espalhamento Compton, como mostra a figura 2.7. Além disso, a alta densidade do material resulta em um bom coeficiente de absorção e a energia de *band gap* permite operações em temperatura ambiente e promove uma alta resistividade ao detector ($10^9 - 10^{11} \Omega cm$).

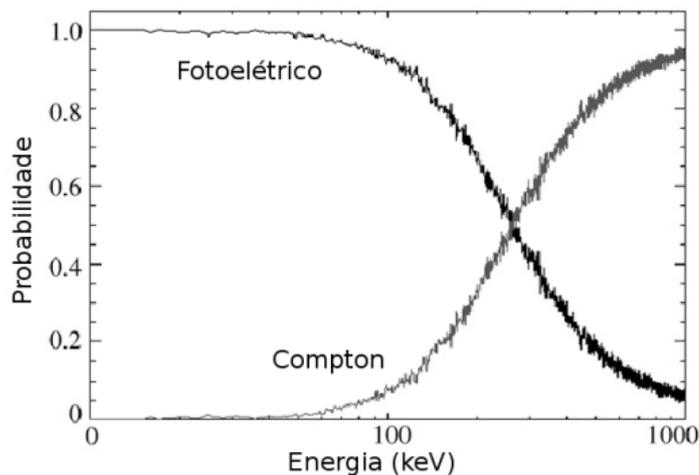


Figura 2.7: Probabilidade do tipo de interação no CdTe em função da energia do fóton incidente. (LIMOUSIN, 2003)

2.4.1 Princípio de operação dos detectores de telureto de cádmio

Quando uma partícula ionizante penetra em um detector, ela produz pares de elétron-lacuna ao longo de sua trajetória no interior do detector. A quantidade de pares elétron-lacuna produzida é proporcional à energia depositada pela partícula incidente. No caso de partículas carregadas, a criação de pares de elétron-lacuna ocorre por meio das várias interações desse tipo de partícula com os elétrons. Por outro lado, os fótons pertencentes à faixa de energia considerada neste trabalho interagem primeiro com um elétron-alvo, podendo ser por efeito fotoelétrico ou Compton. Uma fração da energia depositada dentro do semicondutor é convertida em fônons (vibrações de rede), isto é, energia térmica. Para separar os pares e evitar sua recombinação é necessário aplicar um campo elétrico no detector, que faz com que os elétrons se desloquem na direção do ânodo e as lacunas na direção do cátodo. A figura 2.8 ilustra esse processo, junto com o diagrama esquemático do detector de telureto de cádmio e sua eletrônica associada.

Desta forma, a carga coletada pelos eletrodos produz um pulso de corrente que equivale a carga total gerada pela partícula incidente, isto é, a energia total depositada no detector por esta partícula. Este pulso é aplicado na entrada de um pré-amplificador sensível à carga e conectado a um amplificador e/ou formatador de sinal, para poder ser analisado em seguida.

2.4.2 Coleção de cargas dos detectores de telureto de cádmio

As imperfeições apresentadas na estrutura cristalina do material do detector de telureto de cádmio, como por exemplo, impurezas, deslocamentos planares e efeitos de superfície, podem causar efeitos indesejados. Um deles é a formação de centros de armadilhamento de cargas, que capturam temporariamente uma fração das cargas geradas pela partícula incidente, para

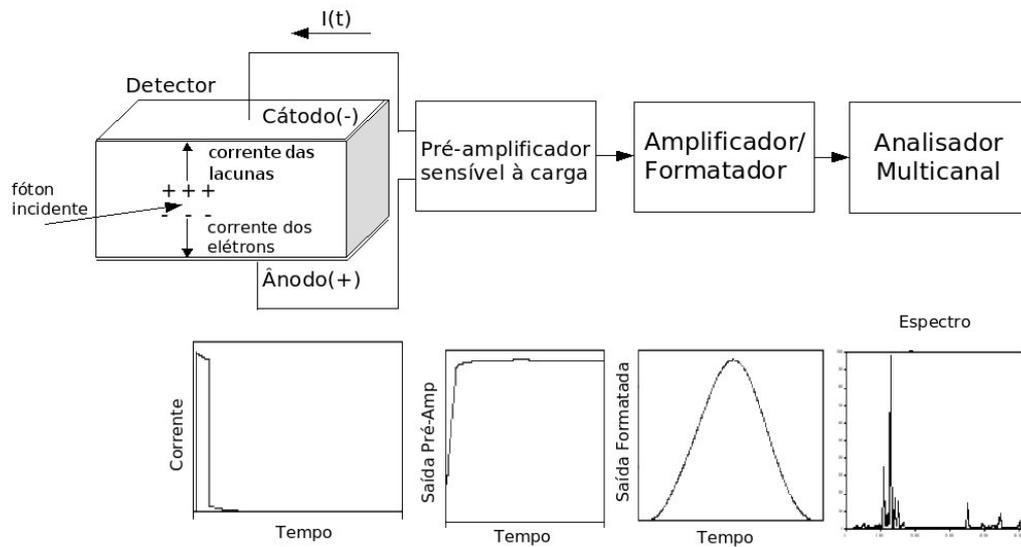


Figura 2.8: Processo da formação do sinal e diagrama esquemático do detector de telureto de cádmio, com sua eletrônica associada. Os sinais típicos de saída de cada estágio são exibidos abaixo do diagrama.

eventual liberação posterior de parte das mesmas (LUTZ, 1999). A quantidade de cargas capturadas depende da distância que os portadores de carga devem percorrer antes de serem coletados e pode ser calculada a partir da distância de deslocamento característica do tipo de portador, que define a probabilidade de captura de elétrons e lacunas pelos centros de armadilhamento:

$$\lambda = (\mu\tau)\varepsilon \quad (2.15)$$

onde μ é a mobilidade dos portadores de carga, τ é o tempo de vida dos portadores de carga e ε é o valor do campo elétrico dentro do detector.

Desta forma, o armadilhamento de cargas impede a completa coleção de cargas pelos eletrodos e provoca uma dependência da eficiência de coleção das mesmas com o local onde ocorre a interação das partículas ionizantes com o detector, fazendo com que a relação entre a carga e a energia absorvida não seja proporcional. A eficiência da coleção de cargas η é definida como a razão entre a carga coletada pelos eletrodos Q_{col} e a carga total gerada na interação Q_{tot} :

$$\eta = \frac{Q_{col}}{Q_{tot}} \quad (2.16)$$

A largura do pulso de corrente gerado pela criação de um par elétron-lacuna é proporcional à distância de separação entre elétron e lacuna até o momento que eles param, que pode ocorrer quando eles são coletados pelos eletrodos ou são capturados por um centro de armadilhamento

de cargas. Assim, o armadilhamento de cargas não somente irá provocar uma redução e flutuação da altura do pulso de corrente, como também irá fazer com que ocorra uma dependência da posição de interação da partícula ionizante com a largura do pulso de corrente formado.

A consequência do armadilhamento de cargas na resposta do espectro é a presença de caudas na região de baixa energia dos fotopicos (EISEN; HOROVITZ, 1994), que são os picos de energia que correspondem à absorção total de energia do fóton incidente, cuja predominância ocorre por efeito fotoelétrico. Portanto, a qualidade do espectro é principalmente limitada pelo efeito da baixa velocidade de transporte de lacunas dentro do cristal do detector de telureto de cádmio.

A equação de Hecht (KNOLL, 1999) descreve como ocorre o transporte de cargas dentro do cristal do detector para a situação de um campo elétrico uniforme, onde a eficiência da coleção de cargas em função da posição da interação é dada por:

$$\eta_{Hecht}(x) = \frac{\lambda_h}{D} \left\{ 1 - \exp \left[\frac{-x}{\lambda_h} \right] \right\} + \frac{\lambda_e}{D} \left\{ 1 - \exp \left[\frac{-(D-x)}{\lambda_e} \right] \right\} \quad (2.17)$$

onde D é a espessura do detector, x é a distância da posição de interação em relação ao cátodo, λ_h e λ_e são as distâncias de deslocamento para lacunas e elétrons, respectivamente.

Outro efeito que também reduz a coleção de cargas pelos eletrodos de um detector semicondutor é a recombinação de cargas. No caso de um diodo alimentado com tensão de polarização reversa (ou bias), a recombinação ocorre somente enquanto os elétrons e lacunas gerados pela partícula ionizante não são separados pelo campo elétrico.

2.4.3 O fator de Fano

O fator de Fano (FANO, 1947) foi introduzido por Ugo Fano, em 1947, ao constatar que as flutuações estatísticas de um contador a gás são menores do que era esperado caso a formação dos portadores de cargas dentro do contador fosse um processo que obedecesse uma distribuição de Poisson. O modelo estatístico de Poisson só é válido na situação em que todos os eventos ao longo da trajetória da partícula ionizante dentro do detector são independentes, onde a variância do número total de pares elétrons-lacunas é igual ao número total desses pares produzido. Tal fator foi adaptado para semicondutores posteriormente (SHOCKLEY; READ, 1952).

Para uma dada energia E depositada dentro do detector, o número de pares elétrons-lacunas gerados irá variar em torno de um valor médio dado por:

$$N = \frac{E}{\epsilon_{par}} \quad (2.18)$$

sendo ϵ_{par} a energia média necessária para a criação de um par elétron-lacuna. A variância do número de pares elétrons-lacunas é dado por:

$$\sigma_N^2 = F \cdot N = F \frac{E}{\epsilon_{par}} \quad (2.19)$$

sendo F o fator de Fano.

O fator de Fano é geralmente determinado por meio da resolução em energia de um dado detector, onde todos os fatores que contribuem para a formação de um dado pico de energia proveniente, por exemplo, de uma fonte radioativa padrão, possam ser estimados e levados em consideração. Assim, o fator de Fano deve ser determinado a partir da largura do pico de energia atribuída somente a efeitos estatísticos:

$$FWHM = 2,35 \sqrt{F \epsilon_{par} E} \quad (2.20)$$

Convém ressaltar que o fator de Fano será superestimado se algum fator não-estatístico permanecer.

2.4.4 CdTe versus CdZnTe

O cristal do CdTe cresce pelo Método de Traveling Heater (FUNAKI et al., 1999; FOUGERES et al., 1999) e o cristal do CdZnTe cresce pela técnica Bridgman de alta pressão (TONEY et al., 1999; FOUGERES et al., 1999). O CdTe é mais fácil de fabricar do que o CdZnTe, o que o torna mais barato. Por outro lado, o CdZnTe oferece uma resistividade mais alta do que o CdTe, devido ao aumento da energia de band gap com a presença de zinco na rede do cristal, diminuindo o valor da corrente de fuga em temperatura ambiente. As propriedades das lacunas são melhores no CdTe do que no CdZnTe. Tanto para o CdTe como para o CdZnTe, os elétrons são muito mais rápidos do que as lacunas.

O uso de uma barreira Schottky em detectores CdTe com 1 mm de espessura promove uma redução da corrente de fuga, que possibilita o uso de tensões reversas mais elevadas e a redução do ruído eletrônico e da flutuação estatística da altura do pulso de corrente. Com isso e as melhores propriedades de transporte de carga do CdTe, a resolução em energia se torna superior em comparação com os detectores CdZnTe de 2 mm de espessura (TAKAHASHI et al., 2002).

3 *Materiais e métodos*

3.1 Simulação de espectros de raios X com o Geant4

Nesta seção é descrito um código computacional que utiliza a versão 7.1.p01 do pacote Geant4 e que foi desenvolvido para simular espectros de energia dos fótons produzidos por um equipamento de raios X.

3.1.1 Descrição do código para a simulação

As simulações dos espectros de raios X foram realizadas em duas fases, uma para a geração dos raios X, a partir das interações dos elétrons com o alvo do ânodo do tubo de raios X, e outra somente para determinar o efeito da filtração sobre o espectro resultante da primeira fase. A razão para esse procedimento foi que a maior parte do processamento computacional necessário para se simular um espectro com todos os efeitos envolvidos vem da primeira fase, que gera um espectro sem filtração para uma dada tensão aplicada no tubo. Assim, na segunda fase é possível calcular vários outros espectros com diferentes filtrações a partir de um espectro obtido na primeira fase, sem grande esforço de processamento.

A primeira fase da simulação para a produção da radiação proveniente de um tubo de raios X consistiu de elétrons colidindo com o alvo do ânodo do tubo com energia correspondente a tensão aplicada no mesmo. Uma visualização da simulação desta fase, fornecida pelo próprio Geant4, é mostrada na figura 3.1.

A energia cinética dos elétrons era escolhida de acordo com um modelo (BOONE; SEIBERT, 1997) que foi adotado para simular o efeito da variação da tensão aplicada no tubo de equipamentos monofásicos de onda completa e trifásicos de seis e doze pulsos, onde o fator de ripple é definido no modelo como:

$$F_R = 100 \times \frac{kV_{max} - kV_{min}}{kV_{max}} \quad (3.1)$$

onde kV_{max} é o valor da tensão de pico, chamado também de kVp, e kV_{min} é o valor mínimo da

tensão aplicada no tubo. Assim, a energia cinética do elétron que incide no alvo é relacionada com a seguinte função que define a tensão aplicada no tubo de raios X:

$$kV(x) = kV_{max} \left[1 - \frac{F_R}{100} (1 - |\sin(2\pi x)|) \right] \quad (3.2)$$

onde x é um número aleatório com valores possíveis entre 0 e 1, obedecendo uma distribuição uniforme. Desta forma, o valor da tensão aplicada no tubo era escolhido para cada valor de x selecionado. O valor da energia de cada elétron primário gerado pelo código computacional era definido de acordo com o valor dessa tensão multiplicado pelo valor da carga do elétron. O valor de F_R deve ser definido como zero para a situação do fator de ripple desprezível, isto é, para as simulações de equipamentos de potencial constante.

O material constituinte do alvo, o ângulo de inclinação do ânodo e o ângulo do feixe emergente também podiam ser escolhidos conforme o tubo que se desejava simular. A energia de cada fóton que atravessa a região de detecção, que consiste de um volume de uma casca esférica, foi gravada em um arquivo de dados.

A inclusão do efeito da filtração inerente, assim como a filtração adicional, era simulada com a incidência de fótons, com a distribuição de energia obtida na primeira fase da simulação, em placas com a espessura e material de acordo com a qualidade da radiação desejada. A geometria da simulação desta etapa é exibida na figura 3.2. O efeito da filtração do ar presente no caminho dos fótons também foi adicionado, com a escolha da distância entre o ponto focal e a área de detecção. Já o efeito do tamanho do ponto focal não foi simulado, por ser considerado desprezível, até mesmo para o efeito heel (AY et al., 2004). O espectro de energia dos fótons emitidos com um ângulo sólido correspondente ao tubo simulado era gravado em um arquivo de dados.

3.1.2 Processos físicos fornecidos pelo Geant4

As simulações desta etapa do trabalho foram realizadas para dois modelos físicos inclusos na biblioteca de classes do Geant4: Low Energy e Penelope. Os seguintes processos, presentes em ambos os modelos, foram incluídos na simulação: espalhamento Compton, efeito fotoelétrico e espalhamento Rayleigh para processos envolvendo fótons e, *bremsstrahlung*, ionização e espalhamento múltiplo para elétrons. O modelo Standard também seria uma outra possibilidade, mas o fenômeno de relaxação atômica não foi implementado para este modelo da versão utilizada. Tal fenômeno é extremamente importante para a simulação da radiação característica de um espectro de raios X. Por causa disso, o modelo Standard não foi usado nas simulações.

No processo físico de ionização, os limites de energia para produção de partículas secun-

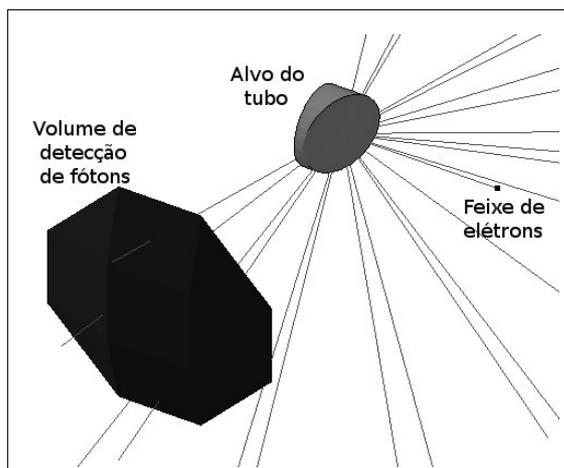


Figura 3.1: Aparato experimental virtual da simulação da geração de raios X, a partir da interação de elétrons colidindo em um alvo de um ânodo de um tubo de raios X.

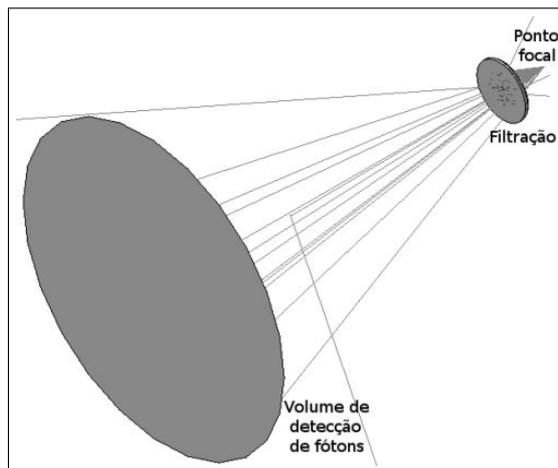


Figura 3.2: Aparato experimental virtual da simulação do efeito da filtração de uma distribuição de energia de fótons de raios X ou gama, para um dado ângulo sólido.

dárias, isto é, elétrons e fótons de fluorescência, foram definidos como 8 keV para os alvos de tungstênio e 6 keV para os alvos de molibdênio. Para o processo físico de bremsstrahlung, o limite de energia para produção de fótons desse processo foi definido também como 8 keV para os alvos de tungstênio e 6 keV para os alvos de molibdênio. Para os outros processos, os limites mandatórios para produção de partículas secundárias foram definidos em termos de distância, sendo 500 nm para elétrons e 3000 nm para fótons. Esses limites foram definidos levando-se em consideração a faixa de energia e os materiais em estudo neste trabalho e para evitar processamento de máquina desnecessário.

O Geant4 disponibiliza três modelos de distribuição angular para o processo de bremsstrahlung, denominados Tsai, 2BN e 2BS (CERN, 2006a). O modelo 2BN fornece bom acordo para a faixa de energia compreendida entre 1 keV e 1 MeV e é o indicado para as simulações deste estudo.

Por ser um efeito mais relevante para transições de energia menores que 2 keV e não ter sido totalmente implementado para todos os elementos na versão utilizada do código, o efeito Auger foi mantido desabilitado para as simulações.

Outros parâmetros também foram testados no código, com o intuito de obter resultados mais realistas possíveis e também para evitar processamento de máquina desnecessário. Esses parâmetros, descritos em um trabalho sobre o transporte de elétrons no Geant4 (POON; SEUNTJENS; VERHAEGEN, 2005), foram o tamanho máximo do passo de uma partícula em um dado volume e a qualidade da aproximação do modelo de espalhamento múltiplo de elétrons. Foi verificado que os parâmetros pré-definidos pelo próprio código fornecem resultados adequados para as simulações.

Além dos limites de distância e de energia, nenhuma outra técnica de redução de variâncias foi empregada para o cálculo dos espectros, pelo fato de terem sido obtidos poucos espectros e pela disponibilidade de uma máquina com excelente poder de processamento, que utiliza dois processadores Intel® Pentium® 4 Xeon® com 2,8 GHz. Outro motivo foi que a versão do Geant4 utilizada não fornecia nenhuma outra técnica de redução de variância adequada para a situação proposta por este trabalho, o que implicaria na necessidade de implementação de uma técnica para o código da simulação. O critério adotado para se obter os espectros com a qualidade estatística desejada foi de que a incerteza percentual do tipo A do canal correspondente a 90% da energia máxima do espectro fosse de no máximo 2%. O número máximo de histórias geradas para se atender esse critério foi de no máximo 16×10^9 histórias, para o caso do tubo com tensão de 25 kV e alvo de molibdênio. O cálculo para obtenção de um espectro sem filtração necessitava em média de 4 dias para ser realizado. Já para a inclusão do efeito da filtração, foram necessários no máximo 10 horas adicionais, que era o caso de um espectro com alta filtração. Para a primeira fase da simulação, a porcentagem de fótons de raios X coletados para cada elétron incidente no alvo variava de 0,005% para uma tensão do tubo de 25 kV e alvo de molibdênio, chegando até 0,09% para uma tensão de 150 kV e alvo de tungstênio.

3.2 Correção de espectros medidos com o detector CdTe

Nesta parte do trabalho são descritos os equipamentos e materiais utilizados para a medição dos espectros de raios X. Além disso, é realizado um detalhamento de como foi feito o cálculo da resposta do detector CdTe e as correções dos espectros medidos com esse detector por meio do método dos mínimos quadrados.

3.2.1 Fontes emissoras de radiação X

Fontes radioativas utilizadas

As fontes radioativas padrão, fabricadas pela AEA Technology QSA GmbH, são seladas com uma camada de resina epóxi. A tabela 3.1 mostra as fontes radioativas padrão utilizadas em calibrações e suas respectivas características.

Equipamento emissor de radiação X

O equipamento emissor de radiação X é um modelo industrial de potencial constante, fabricado pela Philips, composto por um tubo de raios X modelo MCN 323, um gerador de alta tensão (MG 325) e uma unidade de controle (MGC 40). A tensão fornecida pelo gerador de

Tabela 3.1: Fontes radioativas utilizadas em calibrações.

Isótopo	Meia-vida (dias)	Atividade (kBq)	Data	Energias utilizadas (keV)
^{241}Am	$157,85(24) \times 10^3$	396(6)	01/06/1999	11,87;13,93;26,34;59,54
^{133}Ba	3848(6)	432(7)	01/06/1999	81,00
^{152}Eu	4944(2)	415(18)	01/11/1981	121,78

alta tensão pode variar de 15 a 320 kV, com uma resolução de 0,1 kV. A corrente anódica é ajustável entre 0 e 45 mA, com resolução variando de 0,01 mA e 0,05 mA, de acordo com a configuração utilizada. O tubo de raios X é feito de material metal-cerâmico e possui ânodo fixo de tungstênio com ângulo de 22° . O ângulo de abertura do feixe de radiação emergente, sem o uso de colimadores, é de 40° . O tubo também possui dois pontos focais, um de 1,2 mm e outro de 4 mm. A filtração inerente nominal é de 4 mm de berílio.

3.2.2 Sistema de espectrometria XR-100T-CdTe

O sistema de espectrometria utilizado neste trabalho é o modelo XR-100T-CdTe (figura 3.3) da Amptek Inc., que é composto por um detector de raios X e gama, pré-amplificador e resfriador. O detector é um diodo do tipo Schottky de Telureto de Cádmio (CdTe) com contato de platina no cátodo e contato de índio no ânodo, onde a barreira Schottky é formada. Suas dimensões são de $3 \times 3 \times 1 \text{ mm}^3$ e o cristal do detector é montado em um resfriador termoelétrico (célula Peltier). O sistema de resfriamento refrigera tanto o detector CdTe quanto o transistor de entrada de efeito de campo (FET) para um circuito integrado pré-amplificador sensível a carga modelo A250 da Amptek. Para se reduzir ao máximo o ruído eletrônico, um capacitor e parte da malha de realimentação de corrente que vai para o pré-amplificador são também colocadas no mesmo substrato do detector e do FET. Os componentes internos são refrigerados a uma temperatura em torno de -30°C e são monitorados por um circuito integrado sensível a temperatura.



Figura 3.3: Sistema de detecção XR-100T-CdTe. (AMPTEK, 2005a)

Para operar o detector CdTe foi utilizado o processador de pulsos modelo PX2T, da Amptek

Inc. Esse módulo fornece o nível de tensão de polarização reversa, chamada também de tensão de bias, de 400 V necessário para processar o pulso de corrente, que passa por um circuito amplificador e um formatador de sinal. O sinal de saída proveniente do equipamento pode ser conectado diretamente a um analisador multicanal. O analisador multicanal utilizado foi o modelo MCA 8000A, também da Amptek Inc., que possui tempo de conversão menor que 5 μ s e suporta até 16000 canais de dados. Um software de aquisição dos dados do MCA 8000A, chamado PMCA v1.2, também faz parte do sistema de espectrometria.

A figura 3.4 exhibe os principais componentes do sistema de detecção e as ligações do detector com o módulo PX2T e o analisador multicanal MCA 8000A.

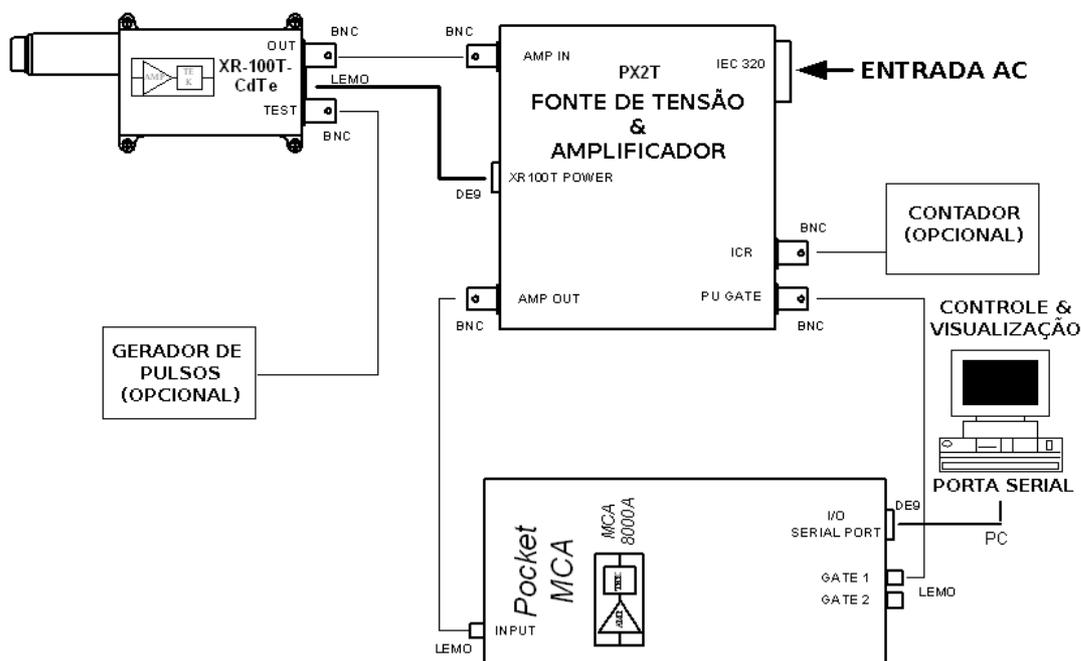


Figura 3.4: Diagrama de conexão do sistema XR-100T- CdTe com o amplificador PX2T e o analisador multicanal MCA 8000A. (AMPTEK, 2005a)

O encapsulamento hermético tipo TO-8 do detector, como mostra a figura 3.5, fica em vácuo, protegido da luz e possui uma janela de berílio (Be) de 250 μ m (AMPTEK, 2005a). Na figura também é possível ver a localização do detector e do monitor de temperatura.

Discriminação do tempo de subida

Para diminuir o efeito do armadilhamento de cargas na formação de espectros de energia medidos por detector semicondutores, a Amptek desenvolveu um módulo eletrônico analógico de discriminação de tempo de subida do pulso, onde os pulsos com tempos de subida mais lentos e mais influenciados pelo armadilhamento de cargas são descartados. Esse módulo é chamado de RTD (sigla de Rise Time Discrimination) e está disponível no módulo PX2T. O módulo RTD é baseado numa técnica de discriminação de formato de pulso, ou PSD (sigla de

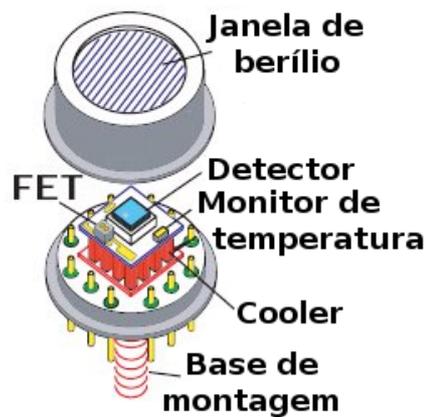


Figura 3.5: Encapsulamento do detector CdTe da Amptek modelo XR-100T-CdTe. (AMPTEK, 2005a)

Pulse Shape Discrimination), chamada de método de comparação de cargas (KNOLL, 1999). No módulo RTD não existe nenhum ajuste de nível (ou threshold) possível para definir o tempo de subida dos pulsos lentos que devem ser descartados.

O princípio de funcionamento do módulo RTD é mostrado na figura 3.6. O sinal em tensão da saída do pré-amplificador é resultante da integração do pulso de corrente transiente gerado quando um fóton interage no cristal do detector. Este sinal em tensão representa o sinal de carga, isto é, a carga total coletada até determinado instante. O sinal de corrente pode ser estimado por meio da diferenciação do sinal em tensão do pré-amplificador.

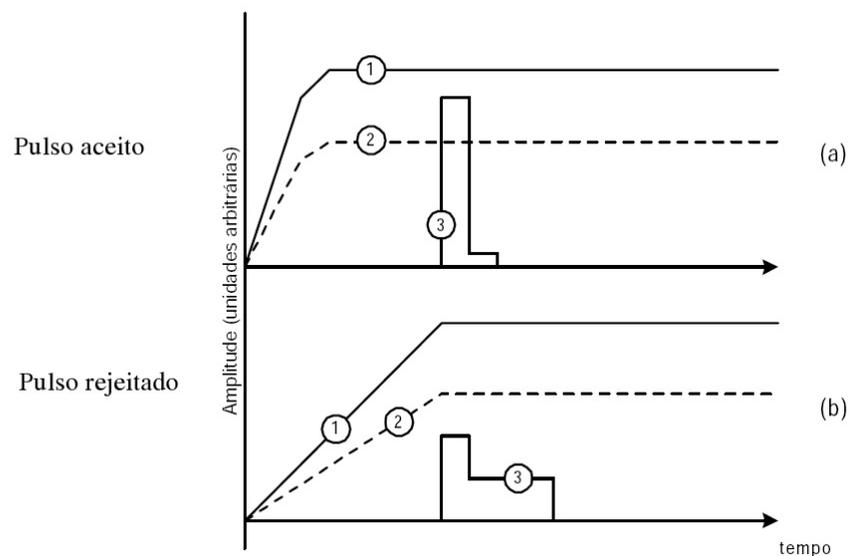


Figura 3.6: Princípio de funcionamento do método de discriminação de tempo de subida: (1) Sinal em tensão do pré-amplificador; (2) Sinal de carga atenuado; (3) Sinal de corrente com atraso.

A discriminação ocorre com a comparação do sinal de corrente integrado atrasado com uma fração do sinal de carga (JORDANOV; PANTAZIS; HUBER, 1996). Desta forma, quando o

sinal de corrente com atraso for menor que o sinal de carga atenuado, o pulso de corrente é rejeitado. Caso contrário, o pulso de corrente é aceito.

Para o detector CdTe, os pulsos com tempos de subida mais lentos ocorrem próximo a região do ânodo do detector, onde a distância a ser percorrida pelas lacunas, que se movem muito mais lentamente que os elétrons, para poder ser coletada no cátodo é maior. Desta forma, o módulo RTD tende a rejeitar pulsos cujos eventos ocorrem a partir de uma determinada distância do cátodo.

As diferenças das contagens entre uma medição de espectro com o RTD desligado e ligado são mostradas na figura 3.7, para uma medição de uma fonte de ^{133}Ba . O efeito do módulo RTD é evidente com a diminuição da cauda formada no lado de baixa energia dos picos de energias correspondentes aos raios gama de 79,6 keV e 81,0 keV. O efeito desse módulo também é menos evidente para fótons com mais baixa energia, que são absorvidos próximos da região do cátodo do detector, onde o efeito do armadilhamento na coleção de cargas é pequeno.

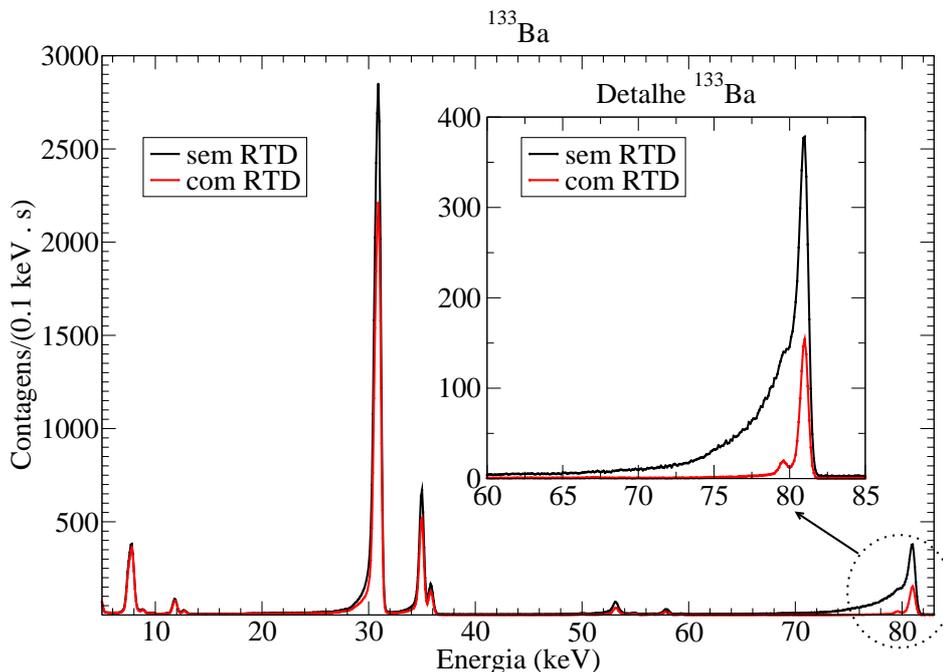


Figura 3.7: Espectro de ^{133}Ba medido com a função RTD habilitada e desabilitada.

Quando o módulo RTD é usado, a eficiência de detecção diminui significativamente pelo que seria esperado pelas dimensões físicas do detector. Como as propriedades de transporte de carga não são bem controladas pelo fabricante do detector, variações significativas de profundidade efetiva com o RTD habilitado são esperadas.

Calibração do sistema de detecção

A curva de calibração do detector CdTe foi determinada por um ajuste linear por meio do método dos mínimos quadrados e utilizando as energias das fontes radioativas de ^{241}Am (11,87 keV; 13,93 keV; 26,34 keV; 59,54 keV), ^{133}Ba (81,00 keV) e ^{152}Eu (121,78 keV), em função do número do canal central correspondente a cada energia. Este procedimento foi realizado tanto para o detector operando com o módulo eletrônico RTD ligado e desligado.

3.2.3 Cálculo da resposta do detector CdTe

Para fazer a correção do espectro medido por um detector, é necessário o conhecimento da resposta do mesmo para cada fóton incidente com energia dentro da faixa de energia que se deseja obter o espectro. Por isso, a resposta do detector foi calculada com o auxílio do método de Monte Carlo, utilizando o Geant4 versão 8.0.p01. Com esse tipo de cálculo, é possível simular espectros medidos pelo detector CdTe e também determinar a matriz de resposta \mathbf{R} do mesmo.

A simulação do espectro medido pelo sistema de detecção utilizando o detector CdTe consistia de fótons de raios X, obedecendo uma determinada distribuição de energia, interagindo com o cristal do detector e com outros componentes do sistema, que são relevantes para a simulação. A figura 3.8 mostra a localização de cada um dos componentes simulados.

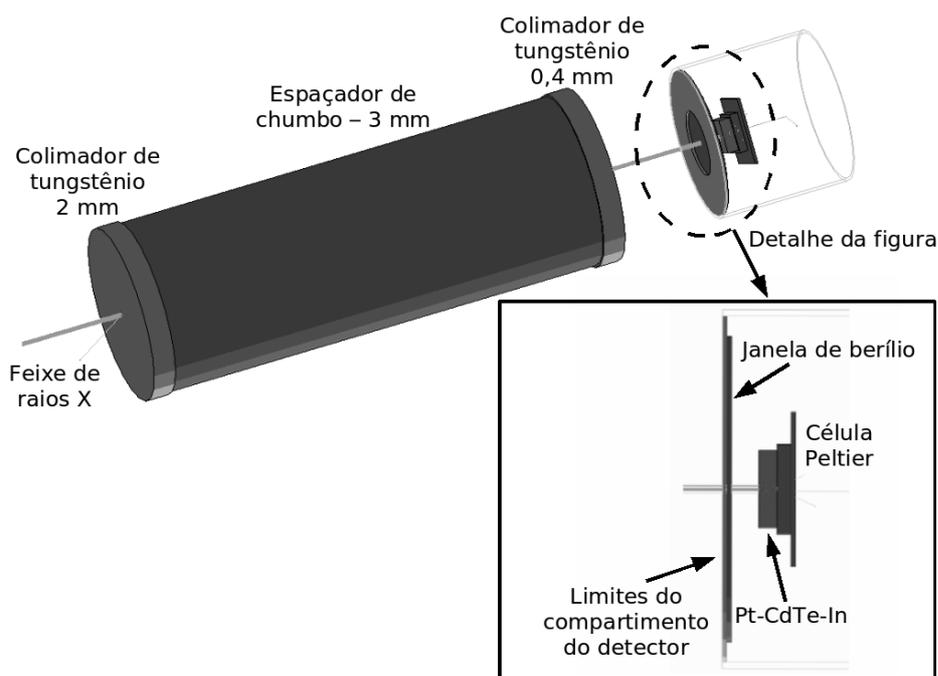


Figura 3.8: Aparato experimental virtual da simulação utilizada para cálculo da resposta do CdTe.

Para o caso do sistema de detecção modelo XR-100T-CdTe, os componentes levados em consideração na simulação, além do cristal do detector de CdTe de dimensões de $3 \times 3 \times 1 \text{ mm}^3$, foram a janela de berílio com $250 \mu\text{m}$ de espessura presente no encapsulamento, os colimadores de tungstênio com 2 mm e 0,4 mm de diâmetro de orifício interno, um espaçador de chumbo com orifício interno de 3 mm de diâmetro e o compartimento do detector, feito de níquel e com espessura de $250 \mu\text{m}$ na parte frontal. Os colimadores e o espaçador possuem a função de delimitar o campo de radiação incidente no detector para que sejam detectados somente os fótons incidentes perpendicularmente e próximos a região central do detector, além de auxiliar a manter a taxa de contagens abaixo de 1 kHz, que é um valor seguro para evitar que o mesmo seja danificado com taxas excessivas. O espaçador possui ainda um revestimento interno de cobre com 2 mm de diâmetro para absorver os fótons de raios X característicos do chumbo. A camada de índio, depositada no ânodo do cristal, e de platina, que cobre o lado do cátodo, também foram incluídas no código para simulação. As espessuras das camadas de índio e de platina são de $0,2 \mu\text{m}$ para os dois casos.

Os fótons incidentes no sistema de detecção podiam ser considerados provenientes de uma fonte pontual, como no caso de uma fonte radioativa próxima ao detector, ou incidentes perpendicularmente a superfície do detector, para a situação de um equipamento de raios X localizado a uma distância do detector onde essa aproximação é possível. As simulações com fontes radioativas também incluíam as camadas de resina epóxi que revestem as fontes utilizadas.

Desta forma, a energia depositada por cada fóton em um determinado local de interação dentro do cristal correspondia a uma quantidade de pares elétrons-lacunas gerados cujo valor médio é dado pela equação 2.18. A partir desses dados, a carga coletada pelos eletrodos para cada fóton incidente no detector, que corresponde a energia registrada para a formação do espectro de energia, era determinada de acordo com a eficiência da coleção de cargas e o efeitos provocados pelo ruído eletrônico e o fator de Fano característicos do detector CdTe utilizado. Esses efeitos não são fornecidos pelo Geant4 e tiveram que ser implementados no código. A eficiência da coleção de cargas foi calculada levando em consideração os principais efeitos que ocorrem dentro do detector CdTe e que influenciam o cálculo da resposta do detector.

3.2.4 Ajuste dos parâmetros para o cálculo da resposta do detector CdTe

Processos físicos fornecidos pelo Geant4

As simulações para modelar o detector CdTe foram realizadas utilizando apenas o modelo físico Low Energy, pelo fato desse modelo ter um acordo levemente superior com os dados de referência na primeira etapa, conforme mostra a análise de resultados. O modelo Low Energy permite também um processamento de dados um pouco mais rápido, pelo fato de trabalhar

diretamente com os valores das seções de choque. No entanto, é importante ressaltar que o modelo Penelope é igualmente indicado pelos desenvolvedores do código para estas simulações, devendo apresentar resultados semelhantes ao Low Energy. Os seguintes processos foram incluídos na simulação: espalhamento Compton, efeito fotoelétrico e espalhamento Rayleigh para processos envolvendo fótons e, *bremsstrahlung*, ionização e espalhamento múltiplo para elétrons.

Os limites de distância para produção de partículas secundárias foram definidos como $1 \mu\text{m}$ para elétrons e $1 \mu\text{m}$ para fótons. Os limites de energia para produção de partículas secundárias foram definidos como 250 eV, que é o valor mínimo aceito pelo modelo Low Energy e possibilita a geração de todas as partículas secundárias permitidas pelo código. Por isso, os limites de distância previamente escolhidos são mandatórios.

Assim como na etapa anterior, o modelo de distribuição angular para o processo de *bremsstrahlung* foi o 2BN e o efeito Auger foi desabilitado.

Os limites de distância e de energia definidos para as simulações nesta etapa do trabalho foram suficientes para realizar os cálculos em um tempo de processamento razoável. Cada simulação de um espectro medido necessitava cerca de 40 minutos de tempo de processamento de máquina para obter uma estatística suficientemente alta. O cálculo da matriz de resposta do detector CdTe para fótons monoenergéticos incidentes no detector com energias variando de 5 até 155 keV em intervalos de 0,2 keV demorava em média 6 dias para ser completado.

Ruído eletrônico e fator de Fano

O primeiro efeito após a criação dos pares elétrons-lacunas que foi incluído na simulação da formação de um espectro medido foi a dispersão simétrica dos valores de energia devido ao ruído eletrônico e ao fator de Fano, observada na figura 3.9.

O ruído eletrônico foi estimado por meio de alguns valores de larguras de fotopicos das fontes radioativas de ^{241}Am e ^{133}Ba e do ajuste de uma função do tipo $y = ax + b$, que representa a equação 2.20, onde y é a largura do canal à meia altura (FWHM) dos fotopicos utilizados no ajuste e x é a raiz das respectivas energias de cada largura. Desta forma, o coeficiente linear b obtido do ajuste é o ruído eletrônico, estimado em 120 eV. O valor adotado para o fator de Fano foi 0,1, de acordo com a literatura (OWENS et al., 2002).

A dispersão devido a esses efeitos era simulado com o sorteio de um valor de energia obedecendo a distribuição gaussiana dessa dispersão para cada energia depositada por cada fóton interagindo dentro do cristal, que é correspondente ao valor médio de energia dessa distribuição. Portanto, o valor de energia sorteado é o valor de energia que leva em consideração os efeitos

do ruído eletrônico e do fator de Fano.

Armadiilhamento de cargas

O efeito do armadiilhamento de cargas era simulado por meio da equação de Hecht (equação 2.17), onde a mesma foi aplicada para cada energia que foi determinada após os efeitos do ruído eletrônico e do fator de Fano. Além da equação de Hecht descrever o efeito do armadiilhamento de cargas, a mesma também tem correspondência direta com a energia que é registrada para a formação do espectro.

O comprimento de deslocamento dos elétrons usado foi de 24 cm, conforme obtido de (JUNG et al., 1999). Pelo fato da variação das caudas e das intensidades dos picos de energia serem mais sensíveis para o deslocamento das lacunas, uma escolha mais específica para o detector utilizado foi realizada. Como pode ser observado na figura 3.9, onde temos a formação dos picos na região de energia de 81 keV da fonte de ^{133}Ba , um valor adequado para o deslocamento das lacunas deve estar próximo de 0,40 cm, que é o valor adotado para este detector. Esta região de energia foi selecionada para o ajuste pelo fato de representar bem o comportamento da formação do espectro com a variação do comprimento de deslocamento das lacunas e também por estar localizado em uma região intermediária da faixa de energia em estudo neste trabalho. Além disso, parte dos fótons com essas energias atingem o detector na região próxima ao ânodo do detector, que é onde existe a maior influência das lacunas para a coleção de cargas.

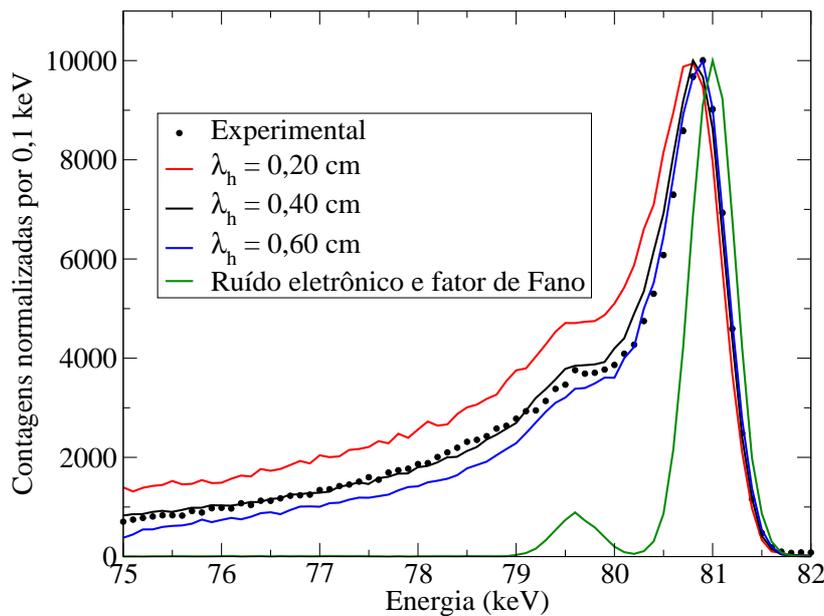


Figura 3.9: Comparação entre diferentes valores de comprimento de deslocamento de lacunas para a formação do pico de energia de 81 keV da fonte de ^{133}Ba e função RTD desabilitada. A dispersão simétrica devido ao ruído eletrônico e o fator de Fano também é mostrada no gráfico.

Módulo eletrônico RTD

A inclusão do efeito do RTD foi feita com uma limitação da profundidade de detecção sensível à radiação incidente no detector, como sugerido em um trabalho sobre o assunto (REDUS et al., 1996). Assim, fótons que depositam sua energia numa posição cuja distância ao cátodo do detector é acima da espessura de detecção sensível do mesmo, terá a sua coleção de cargas rejeitada. A figura 3.10 mostra a influência dessa espessura de detecção na formação do espectro medido com a simulação de diferentes valores de espessuras de detecção sensível. As simulações dos espectros medidos eram realizadas a partir de um espectro de referência (CRANLEY et al., 1997), cujas energias compreendem praticamente toda a faixa de energia em estudo neste trabalho.

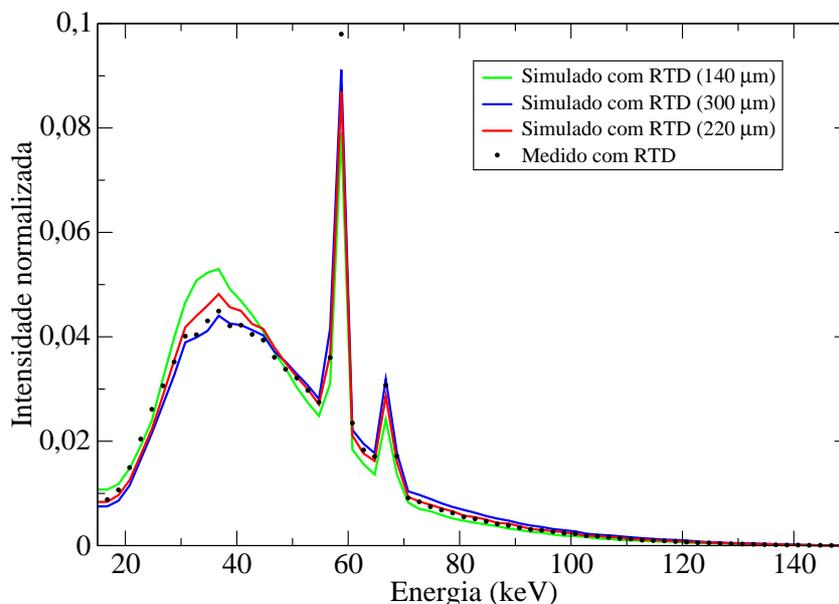


Figura 3.10: Comparação entre espectros de raios X medido e simulados para diferentes valores de espessura de detecção sensível à radiação do detector CdTe devido ao efeito do módulo eletrônico RTD. Características do espectro: tensão do tubo de 150 kVp, alvo de tungstênio com 22°, filtração de 4,0 mm de berílio, 2,5 mm de alumínio.

Como pode ser observado, a simulação com espessura sensível de 140 μm foi a que apresentou pior acordo com o espectro medido. Na simulação da espessura de 300 μm , apesar de apresentar melhor acordo do que a de 140 μm , o espectro simulado mostra uma maior intensidade de fótons com energias acima de 60 keV em comparação com o espectro medido. Isto significa que esses fótons, que possuem a probabilidade de alcançar maiores profundidades dentro da região sensível do detector, estão sendo detectados em uma região acima da espessura sensível à radiação especificada pelo módulo eletrônico RTD. Desta forma, uma espessura

de 300 μm estaria sendo superestimada. Por isso, a espessura do volume de detecção sensível escolhido para o detector utilizado neste trabalho foi de 220 μm .

Região de transição próxima ao cátodo

Alguns trabalhos (FINK et al., 2006; MANFREDOTTI et al., 1996; VITTONI et al., 1999) indicam que o campo elétrico nas bordas do cristal deve sofrer uma deformação que provoca uma diminuição dos comprimentos de deslocamento dos portadores de carga ao se aproximarem dessas regiões. Portanto, como a distribuição do campo elétrico dentro do cristal não pode ser considerada uniforme, a equação de Hecht (equação 2.17) não pode ser usada para o cálculo da eficiência da coleção de cargas nesta região de transição. Por isso, uma função de correção foi usada junto com a equação de Hecht para produzir uma gradual diminuição da eficiência da coleção de cargas na região próxima ao cátodo do detector, que é onde existe maior influência da eficiência da coleção de cargas na faixa de energia em estudo:

$$\eta(z) = \eta_{Hecht}(z) \cdot f_c(z) \quad (3.3)$$

A função $f_c(z)$ é dada por:

$$f_c(z) = \frac{1}{2} \cdot \left\{ \left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{(z-l/2)\frac{\alpha}{l}}^{\infty} e^{-t^2} dt \right] + 1 \right\} \quad (3.4)$$

onde l é um parâmetro que representa a espessura da região de transição e α é o parâmetro associado à inclinação da função de correção, ou seja, como ocorre a variação da diminuição da eficiência da coleção de cargas nessa região.

O valor do parâmetro l foi estimado em 2 μm , conforme sugerido pela literatura (ZAHRAMAN et al., 2006). O parâmetro α foi estimado em 1,5, que é o valor onde a simulação do espectro medido mais se aproxima do espectro real.

As diferenças na eficiência da coleção de cargas dentro do detector CdTe utilizando a equação de Hecht com e sem a inclusão do efeito da região de transição pode ser verificada na figura 3.11. A eficiência da coleção de cargas na região próxima do cátodo sofre uma expressiva diminuição com a inclusão do efeito da região de transição.

Para avaliar o efeito da inclusão da região de transição na equação de Hecht para um espectro de raios X, foram simulados espectros medidos de raios X a partir de um espectro de referência (CRANLEY et al., 1997) utilizando a equação de Hecht com e sem a inclusão do efeito da região de transição para serem comparados com o espectro medido, como mostra a figura 3.12. O espectro selecionado para esta comparação é o que pertence a regiões de mais

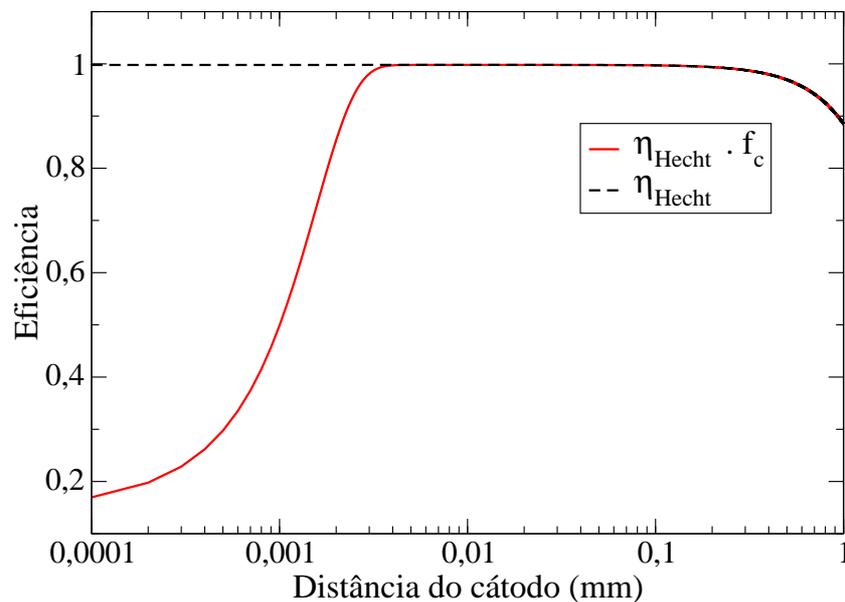


Figura 3.11: Eficiência da coleção de cargas dentro do detector CdTe utilizando a equação de Hecht com e sem a inclusão do efeito da região de transição.

baixa energia dentre os espectros medidos neste trabalho, pois a inclusão desse efeito deve ser melhor percebida nessas regiões.

Verifica-se que as diferenças entre cada um dos espectros simulados com o espectro medido são bem pequenas, mostrando que a inclusão desse efeito pouco interfere nos resultados para as regiões de energia dos espectros medidos neste trabalho. Desta forma, não foi possível verificar por meio desta análise se a inclusão do efeito da região de transição na equação de Hecht proporciona um melhor acordo na simulação de um espectro medido de um tubo de raios X. Mesmo assim, optou-se por manter a inclusão desse efeito na equação de Hecht, devido às evidências da existência desse efeito em outros trabalhos.

3.2.5 Reconstrução do espectro medido utilizando o método dos mínimos quadrados

O método dos mínimos quadrados foi empregado na reconstrução do espectro original medido com um detector CdTe. Este método é capaz de fornecer uma completa propagação de erros, permitindo a obtenção da matriz de variância do espectro reconstruído (MORALLES et al., 2006).

Os dados típicos produzidos em experimentos com detectores semicondutores e analisadores multicanal consistem de um conjunto discreto de números d_i , que podem ser representados

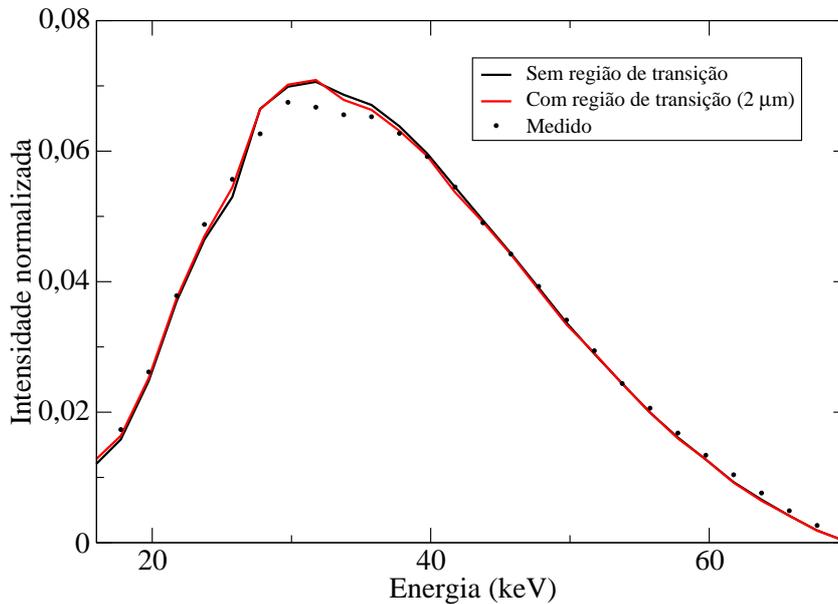


Figura 3.12: Comparação entre espectros medido e simulados utilizando a equação de Hecht com e sem a inclusão do efeito da região de transição. Características: tensão do tubo de 70 kVp, alvo de tungstênio com 22° , filtração de 4,0 mm de berílio, 2,5 mm de alumínio.

por um vetor $\mathbf{d} = d_1, d_2, \dots, d_n$, onde cada índice corresponde a um intervalo de energia que é determinado ao ser realizada a calibração de energia (KNOLL, 1999). Cada valor d_i representa a quantidade de vezes que o detector produziu um sinal que se encontra dentro do intervalo de energia correspondente. Considerando-se o valor d_i independente de um valor d_j , isto é, não correlacionados, e obedecendo uma distribuição de Poisson, a incerteza de d_i é calculada como $\sigma_i = \sqrt{d_i}$ e a de d_j é $\sigma_j = \sqrt{d_j}$. Assim, os elementos da matriz de variância V_d são dados por:

$$V_{d_i,j} = \sigma_i \cdot \sigma_j \cdot \delta_{i,j} \quad (3.5)$$

Na situação de um detector ideal, os valores de \mathbf{d} devem ser equivalentes à distribuição de energia registrada pelo detector, que pode ser representada por um vetor $\mathbf{s} = s_1, s_2, \dots, s_m$. Entretanto, a radiação é sujeita a diversos processos físicos no ambiente e dentro do detector. Esses processos associados a flutuações estatísticas e ruído eletrônico resultam no espectro medido que consiste numa versão distorcida do espectro emitido. Os efeitos que distorcem o espectro podem ser considerados permitindo-se que a radiação emitida com outros valores de energia possa contribuir para o valor medido correspondente a i como:

$$d_i = R_{i,1} \cdot s_1 + R_{i,2} \cdot s_2 + \dots + R_{i,i} \cdot s_i + \dots + R_{i,m} \cdot s_m \quad (3.6)$$

Portanto, a relação entre o espectro medido e o original pode ser representada por:

$$\mathbf{d} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{s} \quad (3.7)$$

onde \mathbf{R} é a matriz que representa a função resposta do sistema de detecção.

Um método muito comum empregado para obter \mathbf{s} , chamado de método de *stripping* (SEELTAG; PANZER, 1979), utiliza espectros medidos ou calculados de fontes monocromáticas para construir a matriz \mathbf{R} . Assim, o espectro original é reconstruído do maior para o menor valor de energia, aplicando o seguinte algoritmo:

$$s_i = \frac{d_i - \sum_{j=i+1}^m R_{i,j} \cdot s_j}{R_{i,i}} \quad (3.8)$$

A propagação de erros experimentais (matriz de variância) para este método não é encontrado na literatura. Sem a matriz de variância de \mathbf{s} não é possível avaliar a significância estatística dos resultados obtidos com o espectro reconstruído. É por esse motivo que o método de mínimos quadrados foi empregado neste estudo para obter \mathbf{s}' do espectro original através de:

$$\mathbf{s}' = (\mathbf{R}^T \mathbf{V}_d^{-1} \mathbf{R})^{-1} \mathbf{R}^T \mathbf{V}_d^{-1} \mathbf{d} \quad (3.9)$$

A matriz de variância de \mathbf{s}' , necessária para a propagação de erros em qualquer operação que envolva \mathbf{s}' , é dada por:

$$\mathbf{V}_{\mathbf{s}'} = (\mathbf{R}^T \mathbf{V}_d^{-1} \mathbf{R})^{-1} \quad (3.10)$$

O procedimento de inversão da equação 3.9 é impossível nas situações em que a matriz $\mathbf{R}^T \mathbf{V}_d^{-1} \mathbf{R}$ é singular ou quase singular. Por isso, métodos de truncagem ou regularização (MORHÁC, 2006; SÜKÖSD et al., 1995; TAKIYA et al., 2004) podem ser aplicados para obter uma solução ou até mesmo atenuar as oscilações. Neste trabalho foi decidido utilizar o método de truncagem, onde a condição $m < n$ deve ser satisfeita.

3.3 Metodologia de comparação dos espectros

A comparação entres os espectros simulados, corrigidos e usados como referência que estão presentes neste trabalho foram feitas através de uma análise qualitativa visual, a partir de representações gráficas dos espectros de energia e dos resíduos, e de cálculos dos valores de energia média, camada semi-redutora, diferença absoluta média e rendimento dos raios X ca-

racterísticos da camada K. A verificação da compatibilidade entre os resultados encontrados foi realizada por meio do cálculo das incertezas tipo A, de origem estatística, e quando possível, incertezas tipo B, que possuem outras origens. É importante enfatizar que as incertezas tipo B provenientes das seções de choque da base de dados utilizada pelo Geant4 não foram incluídas, pois o código não fornece informações sobre essas incertezas.

Dois desses parâmetros, a energia média e a camada semi-redutora, são comumente usados por hospitais e laboratórios de pesquisa e dependem da distribuição em energia do espectro de raios X. Tais parâmetros são usados para caracterizar a capacidade de penetração do feixe de radiação.

3.3.1 Processo de relocação de espectros multicanais

Existem certas situações em que um espectro de energia multicanal necessita ser comparado com um outro espectro multicanal, mas é imprescindível que os canais dos mesmos tenham correspondência em energia para ser possível proceder com a análise. Outro caso em que essa condição é necessária é na reconstrução de um espectro medido por um detector, quando é realizada por meio da matriz de resposta desse mesmo detector. Isto significa que o primeiro canal do espectro medido deve ter uma correspondência com o mesmo valor de energia do primeiro canal da matriz de resposta, ou seja, se o primeiro canal da matriz de resposta for correspondente ao valor de energia zero, o primeiro canal do espectro medido também deverá corresponder ao valor zero de energia. Desta forma, nestas situações é preciso empregar um algoritmo de relocação de contagens de canais para os espectros multicanais medidos para que essa correspondência seja satisfeita. O procedimento escolhido (TSAI; MUCCILO; HELENE, 1994) produz um espectro relocado que mantém a independência das contagens entre os canais e a distribuição de Poisson do espectro original, o que não seria possível caso fosse utilizada uma relocação determinística (HELENE; MORALLES, 1996). Portanto, o método utilizado permite que o novo espectro seja analisado da mesma forma que o original. No entanto, é importante ressaltar que esse método possui uma limitação na caracterização de picos muito estreitos presentes no espectro, que deve ser levada em consideração para determinadas situações.

3.3.2 Energia média

O cálculo da energia média do espectro foi realizado utilizando a seguinte equação:

$$\bar{E} = \frac{\sum_{i=1}^N (E_i \cdot C_i)}{\sum_{i=1}^N C_i} \quad (3.11)$$

onde E_i é a energia correspondente ao canal i , C_i são as contagens desse canal e N é o número total de canais. A sua incerteza padrão é:

$$\sigma_{\bar{E}} = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^N (E_i - \bar{E})^2 \cdot C_i}}{\sum_{i=1}^N C_i} \quad (3.12)$$

3.3.3 Camada semi-redutora

O valor da camada semi-redutora de um determinado espectro de raios X pode ser determinado por meio da equação 2.12, onde a solução da mesma para $N > 1$ pode ser obtida numericamente. Desta forma, foi utilizado um algoritmo que testa valores de x_{CSR} a partir de um valor inicial para se chegar ao valor final, que deve obedecer a seguinte inequação:

$$0,5 - \Delta < \frac{\sum_{i=1}^N C_i \cdot E_i \cdot \exp(-\mu_i x) \cdot \left(\frac{\mu_{tr}}{\rho}\right)_{ar, E_i}}{\sum_{i=1}^N C_i \cdot E_i \cdot \left(\frac{\mu_{tr}}{\rho}\right)_{ar, E_i}} < 0,5 + \Delta \quad (3.13)$$

O intervalo de validade da inequação 3.13 escolhido foi $\Delta = 0,0015$, de forma que a incerteza inerente ao processo dessa solução seja desprezível. O valor definido para valor inicial no processo iterativo foi o valor de espessura de camada semi-redutora que seria obtido para um feixe monoenergético com energia $\langle E \rangle$ equivalente à energia média do espectro que se deseja obter o valor de x_{CSR} :

$$x_{inicial} = -\frac{\ln(1/2)}{\mu_{\bar{E}}} \quad (3.14)$$

Os coeficientes de transferência de energia necessários para os cálculos das camadas semi-redutoras foram substituídos pelos coeficientes de absorção de energia. A razão disso é que para materiais de Z pequeno, como os presentes no ar, e para energias menores ou da ordem de 1 MeV, a energia transferida ao meio é praticamente toda absorvida.

Os coeficientes de atenuação para fótons utilizados no cálculo da camada semi-redutora

foram obtidos de tabelas fornecidas pelo NIST (sigla inglesa de National Institute of Standards and Technology) (SELTZER; HUBBELL, 2004) e, de acordo com (CULLEN; HUBBELL; KISSEL, 1997), suas incertezas para fotoionização podem chegar a até 2% na faixa de energia de estudo deste trabalho. Pelo fato do processo de fotoionização ser predominante nesta faixa de energia, para os outros processos foi assumido que a contribuição seja de 1%, totalizando uma incerteza de 3% para as seções de choque. Assim, considerando esse valor temos:

$$\sigma_{\mu(E)} = \frac{3}{100} \mu(E) \quad (3.15)$$

Portanto, a incerteza da CSR foi estimada usando a seguinte aproximação:

$$\sigma_{x_{CSR}} \approx \sigma_{x_{inicial}} = \frac{\ln(1/2)}{\mu(E)^2} \sigma_{\mu(E)} = \frac{3}{100} \frac{\ln(1/2)}{\mu(E)} \quad (3.16)$$

Neste trabalho, todos os valores de camadas semi-redutoras foram calculados para o alumínio.

3.3.4 Rendimento de raios X característicos

O rendimento dos raios X característicos da camada K é dado pela fração da quantidade de fótons característicos gerados pela quantidade total de fótons gerados no espectro. A quantidade de fótons de cada pico característico foi estimada por meio da diferença entre a intensidade total e a intensidade de bremsstrahlung, a qual foi calculada como sendo a média das intensidades dos raios X de bremsstrahlung dos canais de energia posterior e anterior de cada pico característico.

Esta comparação indica a contribuição dos raios X característicos para cada espectro e fornece uma análise das discrepâncias entre os processos de cada modelo responsáveis pela geração de cada tipo de radiação.

3.3.5 Diferença absoluta média

Dados dois espectros de N canais, ambos normalizados pela área das intensidades e com a mesma correspondência em energia, a comparação entre eles também pode ser realizada pela diferença absoluta média (ou desvio médio) das intensidades de cada canal, que é definida como a média dos módulos das diferenças. Tal análise quantifica a discrepância entre o espectro simulado e o de referência. Como os espectros são normalizados, a comparação deve ser feita com a diferença absoluta média, pois a diferença média é zero, devido à compensação entre as diferenças negativas e positivas.

A diferença absoluta entre as contagens do canal i do espectro de referência (C_{Ri}) e simulado (C_{Si}) é dada por:

$$D_i = |C_{Ri} - C_{Si}| \quad (3.17)$$

Logo, a diferença absoluta média é:

$$\bar{D} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N D_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |C_{Ri} - C_{Si}| \quad (3.18)$$

A dispersão dos valores das diferenças absolutas de cada canal, definida na equação 3.19, indica quanto as diferenças absolutas de cada canal se dispersam em relação ao valor da diferença absoluta média.

$$\sigma_D^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (D_i - \bar{D})^2 \quad (3.19)$$

Por fim, o desvio padrão da diferença absoluta média é calculado a partir de:

$$\sigma_{\bar{D}} = \frac{\sigma_D}{\sqrt{N}} \quad (3.20)$$

3.3.6 Espectros de referência utilizados para comparação

Os catálogos descritos a seguir foram utilizados como referência para comparação com os espectros simulados e corrigidos por meio dos códigos computacionais desenvolvidos neste trabalho.

IPEM Report n. 78: : Catalogue of Diagnostic X-ray Spectra and Other Data

O relatório número 78 (CRANLEY et al., 1997) do Institute of Physics and Engineering in Medicine (IPEM) é um catálogo de espectros de raios X na faixa de energia de radiodiagnóstico e mamografia que atualmente é publicado na versão eletrônica (CD-ROM). Tal versão inclui um software para processamento de espectros, que permite a geração de espectros com uma variedade de materiais de alvos e filtros, além da tensão do tubo sem ripple para a faixa de energia em questão. O software se baseia no modelo semi-empírico de Birch e Marshall (BIRCH; MARSHALL, 1979) para calcular os espectros e usa a biblioteca de seções de choque para fótons XCOM (BERGER; HUBBELL, 1987). Os espectros podem ser calculados para alvos de tungstênio com ângulos de inclinação que variam de 6° a 22° , em intervalos de 1° , e em tensões de tubo que variam de 30 até 150 kVp. Os espectros de mamografia são fornecidos para tensões de potencial constante de 25 a 32 kV para alvos de molibdênio e ródio com ângulos

de inclinação entre 9° e 23° . Vários materiais podem ser usados como filtro e os espectros são fornecidos em canais de 0,5 keV de resolução. Este catálogo foi usado como referência para comparação com os espectros por causa da sua grande disponibilidade e popularidade (AY et al., 2004; NG; TANG, 2000; AY et al., 2005; BHAT et al., 1998; WILKINSON; JOHNSTON; HEGGIE, 2001).

Os espectros calculados a partir desta referência para este trabalho incluem espectros para a faixa de energia comumente empregada em mamografia (25 kVp e 30 kVp) e utilizando alvos de molibdênio com ângulo de inclinação do ânodo de 17° . A filtração adicional inclui 0,5 mm de alumínio e 0,03 mm de molibdênio. Para os espectros de radiodiagnóstico a faixa de energia adotada varia de 40 kVp até 150 kVp, com alvo de tungstênio e ângulo de inclinação do anodo de 22° . As filtrações adicionais variam de 2,5 mm de alumínio até 5 mm de cobre.

Handbook of Mammography Spectra

Apesar de ter sido publicado em 1978 e dos significativos avanços realizados na espectroscopia experimental desde então, este manual (FEWELL; SHUPING, 1978) ainda é um dos mais completos documentos de medições experimentais na área disponível atualmente (AY et al., 2005). Além disso, o manual contém espectros medidos somente com filtração inerente, o que possibilita ao usuário modificar os espectros utilizando propriedades de atenuação conhecida de qualquer material para filtração adicional. Uma das desvantagens de se utilizar os espectros deste manual como referência é a largura dos canais de 1 keV por canal, adotada pelo documento. Tal largura não possibilita uma comparação visual muito detalhada para a faixa de energia de mamografia, que geralmente vai até 35 keV.

O espectro utilizado neste trabalho como referência foi o gerado pelo tubo de raios X Dynamax M64 (Machlett Laboratories, Stanford, CT), com alvo de molibdênio, filtração inerente de 0,6 mm de alumínio equivalente a 30 kVp e ângulo de inclinação do ânodo de 12° .

Handbook of Computed Tomography X-ray Spectra

Este manual (FEWELL; SHUPING; HEALY, 1981) é similar ao publicado por Fewell em 1978, tanto em popularidade quanto em qualidade das informações, mas sendo específico para radiologia diagnóstica. A largura dos canais dos espectros tabulados neste manual é de 2 keV por canal e alguns deles também foram medidos sem filtração adicional.

O espectro fornecido por este documento como referência para o presente trabalho foi o gerado pelo tubo de raios X Machlett Aeromax, com alvo de tungstênio, filtração inerente de 2,5 mm de alumínio equivalente a 120 kVp e ângulo de inclinação do ânodo de 20° .

4 *Análise de resultados e discussões*

4.1 **Espectros de raios X simulados com o Geant4**

A seguir, são apresentados os resultados obtidos dos espectros de raios X que foram simulados de acordo com os parâmetros exibidos na tabela 4.1. As combinações de tensão aplicada no tubo, material do alvo, ângulo de inclinação do ânodo e filtração adicional foram escolhidas para obter uma variação desses parâmetros que sejam comuns em radiologia diagnóstica e possibilitar a apresentação das diferenças entre os espectros simulados com o Geant4 e os de referências. Conforme descrito no capítulo 3, os resultados das simulações foram obtidos depois de um estudo detalhado de possíveis parâmetros de simulação que poderiam contribuir para a qualidade dos mesmos.

Foram simulados três espectros de raios X com combinação de parâmetros relacionados com a faixa de energia empregada em mamografia, representada pelos espectros com tensões do tubo de 25 e 30 kVp, e outros cinco espectros para analisar a aplicação do Geant4 na radiologia diagnóstica, com tensões de 70, 100, 120 e 150 kVp. O espectro com tensão de 40 kVp, não é usado normalmente para nenhuma das duas técnicas radiográficas, mas pode ser usado para calibração do feixe de raios X e representa também uma energia intermediária entre as técnicas simuladas. A referência utilizada para cada situação consta na tabela 4.2, onde a categoria do modelo em que se enquadra o trabalho da referência é especificada, sendo duas referências de espectros experimentais e uma de espectros obtidos por um modelo semi-empírico.

Nas figuras de 4.1 a 4.9 são mostradas as comparações visuais entre os espectros de raios X simulados usando o Geant4, modelos Low Energy e Penelope, e os espectros de referência utilizados. Ambos os modelos físicos apresentam resultados similares para todas as situações propostas. Os espectros são apresentados com a área normalizada pela unidade e com um gráfico da diferença relativa entre os espectros simulados com o de referência, para facilitar a visualização qualitativa das diferenças, podendo verificar o quanto a intensidade de cada canal do espectro simulado por cada modelo desvia da intensidade do espectro de referência. As incertezas das intensidades de cada canal de energia são menores que os pontos que indicam os

¹Al_{Eq} significa alumínio equivalente

Tabela 4.1: Combinação de parâmetros utilizados nas simulações dos espectros de raios X com o Geant4. A distância do ponto focal do tubo até a região de interesse é de 1 m para todos os espectros. O fator de ripple é zero para todos os espectros, exceto para o da figura 4.3, que é de 6%.

Espectro da figura	Tensão do tubo (kVp)	Material/Ângulo do alvo	Al_{Eq}^1 (mm)	Filtração			
				Be (mm)	Al (mm)	Mo (mm)	Cu (mm)
4.1	25	Mo/17°		0,5	0,5	0,03	
4.2	30	Mo/17°		0,5	0,5	0,03	
4.3	30	Mo/12°	0,6		0,5	0,03	
4.4	40	W/22°		4,0	2,5		
4.5	70	W/22°		4,0	2,5		
4.6	100	W/22°		4,0	2,5		
4.7	100	W/22°		4,0	2,5		5,0
4.8	120	W/20°	2,5		2,0		
4.9	150	W/22°		4,0	2,5		

Tabela 4.2: Espectros de referências utilizados nas comparações.

Espectro da figura	Espectro de referência	Categoria do modelo
4.1	(CRANLEY et al., 1997)	Semi-empírico
4.2	(CRANLEY et al., 1997)	Semi-empírico
4.3	(FEWELL; SHUPING, 1978)	Experimental
4.4	(CRANLEY et al., 1997)	Semi-empírico
4.5	(CRANLEY et al., 1997)	Semi-empírico
4.6	(CRANLEY et al., 1997)	Semi-empírico
4.7	(CRANLEY et al., 1997)	Semi-empírico
4.8	(FEWELL; SHUPING; HEALY, 1981)	Experimental
4.9	(CRANLEY et al., 1997)	Semi-empírico

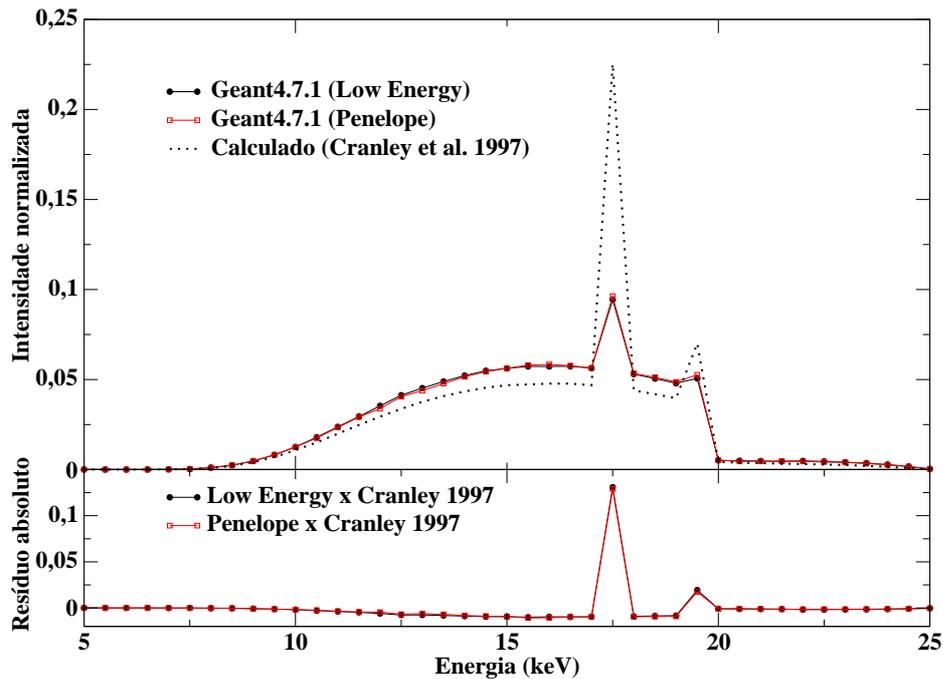


Figura 4.1: Comparação entre espectros simulados com o Geant4 (modelos Low Energy e Penelope) e calculado (CRANLEY et al., 1997). Características: tensão do tubo de 25 kV_p, alvo de molibdênio com 17°, filtração de 0,5 mm de berílio, 0,5 mm de alumínio e 0,03 de molibdênio.

seus respectivos valores de intensidade.

O espectros das figuras 4.1, 4.2 e 4.3 foram gerados com alvo de molibdênio, que é muito usado em mamografia. Como pode ser verificado nas figuras, os espectros simulados para esta faixa de energia e com este tipo de alvo são os que apresentam maiores discrepâncias, com uma baixa intensidade de raios X característicos produzidos pelos modelos Low Energy e Penelope, o que acarreta na produção de radiação de freamento maior, quando comparados com os espectros de referência.

Convém ressaltar que na comparação de espectros da figura 4.3, o pico característico de mais alta energia do molibdênio não se torna muito aparente para os modelos simulados com o Geant4, devido à baixa resolução de energia do espectro, que deve ser a mesma adotada pela referência (FEWELL; SHUPING, 1978).

Como visto nas comparações anteriores, se a intensidade de radiação (*bremstrahlung* ou radiação característica) gerada por um determinado processo for superestimada, o outro processo terá a sua intensidade subestimada. Portanto, é possível verificar o acordo da produção de fótons de raios X de *bremstrahlung* de um modo mais conveniente comparando espectros produzidos sem raios X característicos, como mostram as figuras 4.4 e 4.5, que usam alvo de tungstênio. A faixa de energia desses espectros compreende a faixa de energia de mamografia e acima dela, chegando até 70 keV, e verifica-se um excelente acordo com os espectros de referên-

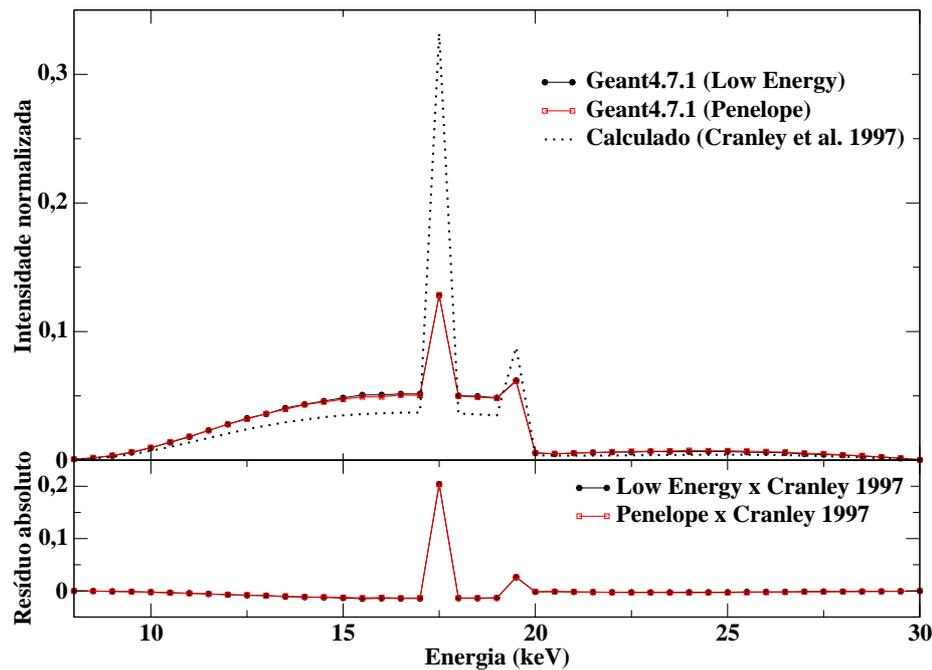


Figura 4.2: Comparação entre espectros simulados com o Geant4 (modelos Low Energy e Penelope) e calculado (CRANLEY et al., 1997). Características: tensão do tubo de 30 kVp, alvo de molibdênio com 17° , filtração de 0,5 mm de berílio, 0,5 mm de alumínio e 0,03 mm de molibdênio.

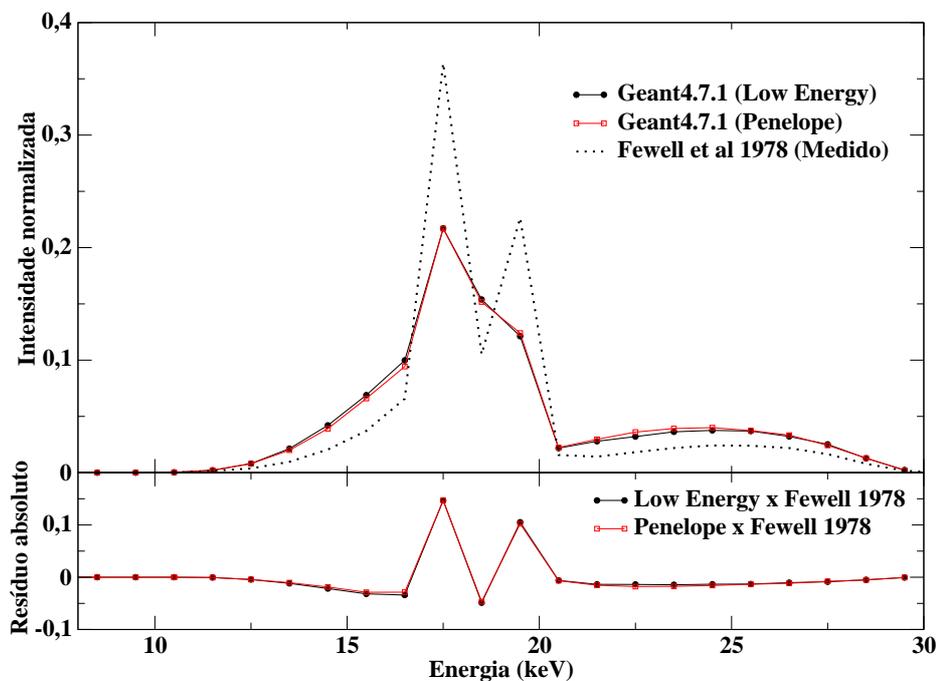


Figura 4.3: Comparação entre espectros simulados com o Geant4 (modelos Low Energy e Penelope) e calculado (FEWELL; SHUPING, 1978). Características: tensão do tubo de 30 kVp, alvo de molibdênio com 12° , filtração de 0,5 mm de alumínio equivalente e 0,03 mm de molibdênio.

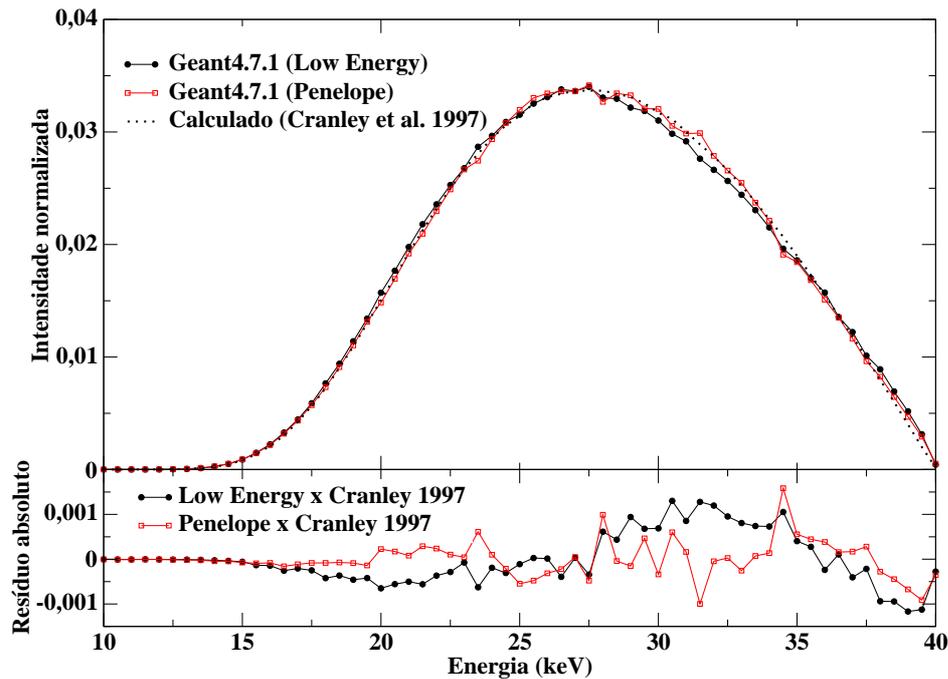


Figura 4.4: Comparação entre espectros simulados com o Geant4 (modelos Low Energy e Penelope) e calculado (CRANLEY et al., 1997). Características: tensão do tubo de 40 kVp, alvo de tungstênio com 22°, filtração de 4,0 mm de berílio, 2,5 mm de alumínio.

cia. Por isso, a partir dessas duas comparações, é possível concluir que simulações com alvos de tungstênio para a faixa de energia de mamografia devem apresentar resultados semelhantes a estes, por causa da ausência dos picos característicos nesta situação.

Os espectros das figuras 4.6, 4.7, 4.8 e 4.9 abrangem uma faixa de energia onde a produção de raios X característicos já ocorre, sendo possível verificar novamente a baixa produção dos mesmos nos espectros simulados, quando comparados com o espectro de referência. Apenas os espectros da figura 4.7 possuem um bom acordo, devido à alta filtração presente no espectro, que atenua consideravelmente os raios X característicos. Como a faixa de energia desses espectros é mais larga e a contribuição de fótons gerados por *bremsstrahlung* é maior do que na faixa de energia de mamografia, os acordos desses espectros simulados com o Geant4 com os espectros das referências são melhores.

Na comparação dos espectros simulados com o espectro medido (FEWELL; SHUPING; HEALY, 1981) mostrado na figura 4.8, é possível notar uma maior diferença nas intensidades de *bremsstrahlung* na região de mais baixa energia (de 20 até 50 keV) do que nas outras comparações, que utilizam o catálogo de espectros calculado para situações semelhantes (figuras 4.6 e 4.9). Uma provável causa disso é que nas simulações a filtração inerente foi calculada em termos de equivalência em alumínio, conforme informado pelo catálogo, e não com a filtração inerente real, com todos os seus materiais constituintes como, por exemplo, o vidro do tubo, o óleo presente na cúpula e um eventual filtro de alumínio. Essa insuficiência no detalhamento da

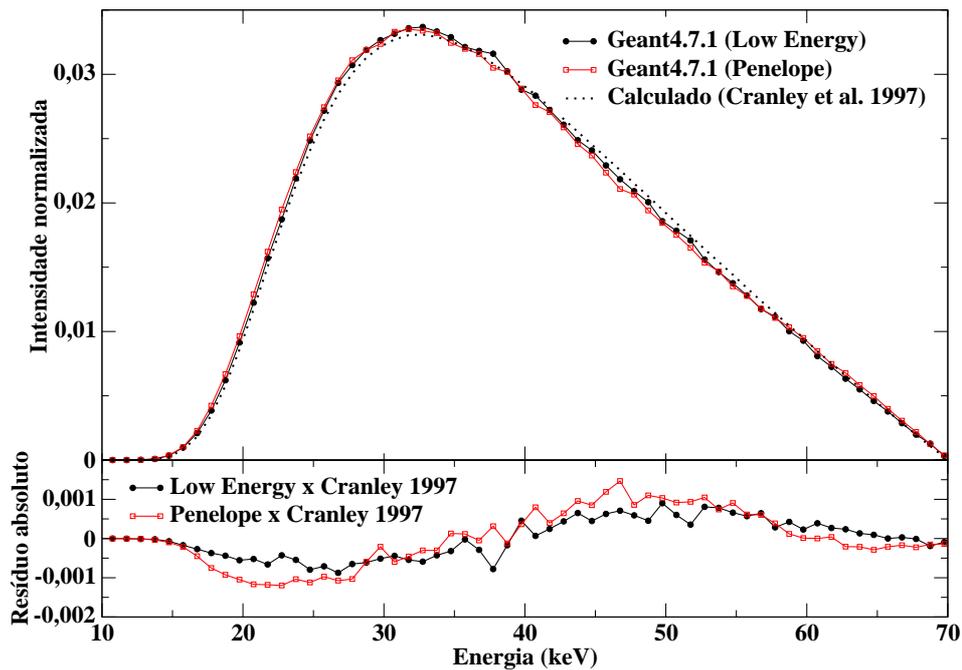


Figura 4.5: Comparação entre espectros simulados com o Geant4 (modelos Low Energy e Penelope) e calculado (CRANLEY et al., 1997). Características: tensão do tubo de 70 kVp, alvo de tungstênio com 22°, filtração de 4,0 mm de berílio, 2,5 mm de alumínio.

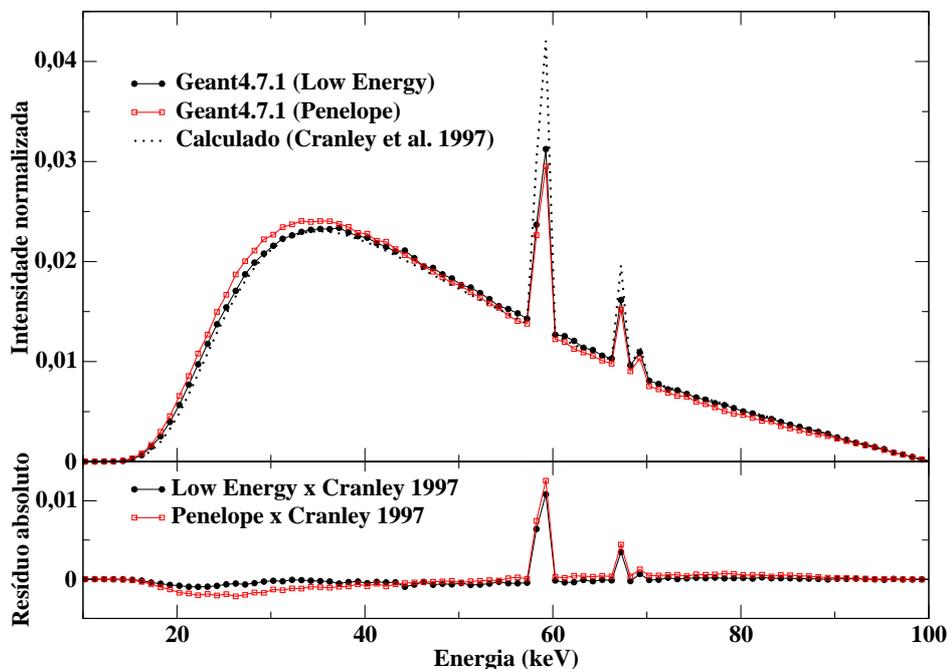


Figura 4.6: Comparação entre espectros simulados com o Geant4 (modelos Low Energy e Penelope) e calculado (CRANLEY et al., 1997). Características: tensão do tubo de 100 kVp, alvo de tungstênio com 22°, filtração de 4,0 mm de berílio, 2,5 mm de alumínio.

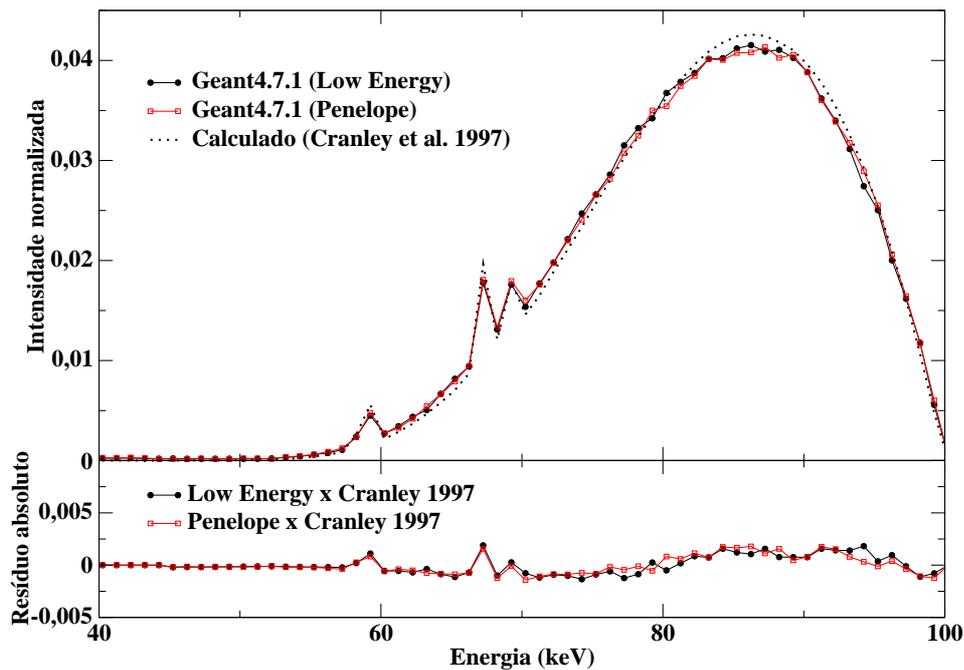


Figura 4.7: Comparação entre espectros simulados com o Geant4 (modelos Low Energy e Penelope) e calculado (CRANLEY et al., 1997). Características: tensão do tubo de 100 kVp, alvo de tungstênio com 22°, filtração de 4,0 mm de berílio, 4,0 mm de alumínio e 5,0 mm de cobre.

filtração inerente causa diferenças nas simulações predominantemente em energias mais baixas dos espectros.

Uma análise estatística dos espectros simulados foi realizada com o cálculo das diferenças absolutas médias, conforme exibido na tabela 4.3. As maiores diferenças foram encontradas nas comparações com os espectros da faixa de energia de mamografia, sendo que a maior diferença foi a comparação com o espectro medido de 30 kVp 4.3, que pode ter acontecido devido em parte à não inclusão nas simulações dos reais materiais constituintes da filtração inerente dos tubos de raios X. O uso da filtração equivalente em alumínio em vez da real também justifica a maior diferença encontrada para a comparação que usa o espectro medido de 120 kVp 4.8, pois as outras comparações nessa faixa de energia (100 kVp e 150 kVp) apresentam menores diferenças. Dentre todas as comparações, as menores diferenças foram verificadas nos espectros onde não existe a produção de raios X característico, além da dispersão dos valores das diferenças absolutas ter sido muito menor também.

As diferenças absolutas médias apresentadas pelos dois modelos são compatíveis para as simulações na faixa de energia de mamografia e mostram que ambos os modelos apresentam níveis de discrepâncias semelhantes para esta faixa de energia. Para faixas de energias acima da faixa de mamografia, o modelo Low Energy possui uma pequena vantagem para a maior parte das simulações. As dispersões dos valores das diferenças absolutas médias dos dois modelos

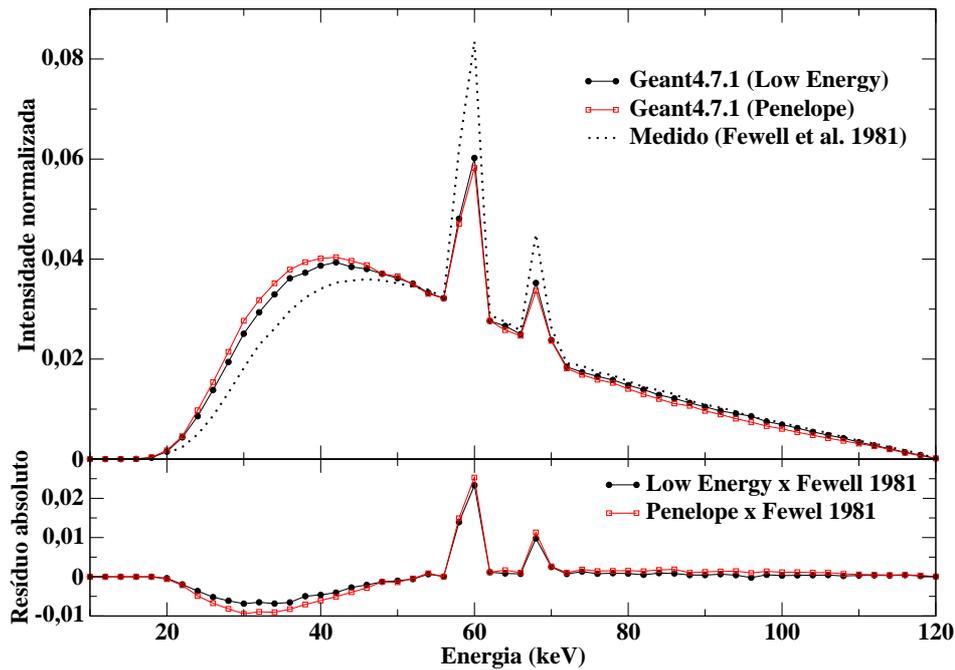


Figura 4.8: Comparação entre espectros simulados com o Geant4 (modelos Low Energy e Penelope) e calculado (FEWELL; SHUPING; HEALY, 1981). Características: tensão do tubo de 120 kVp, alvo de tungstênio com 20°, filtração de 2,5 mm de alumínio equivalente e 2,0 mm de alumínio.

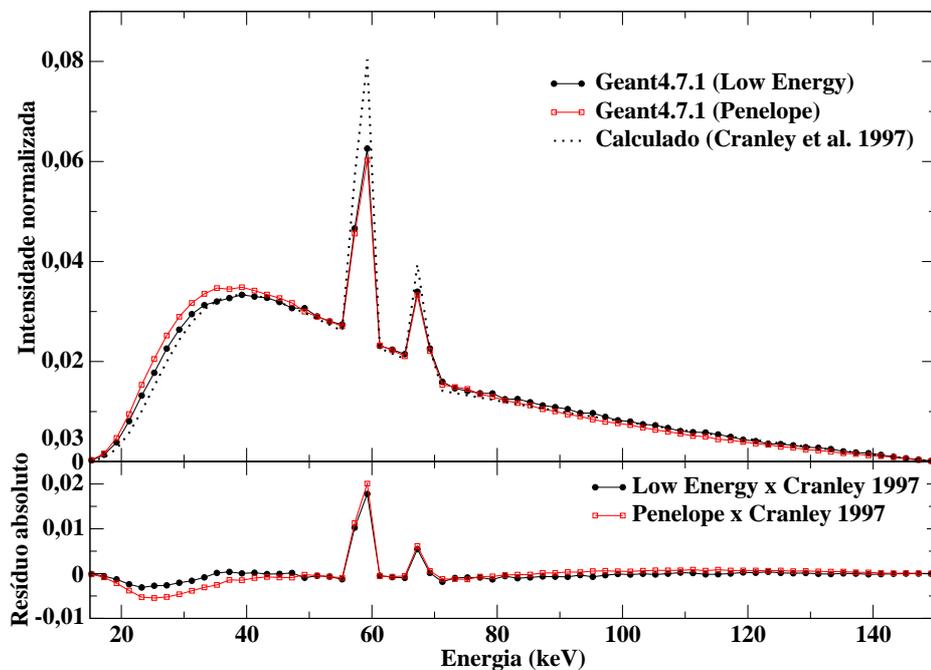


Figura 4.9: Comparação entre espectros simulados com o Geant4 (modelos Low Energy e Penelope) e calculado (CRANLEY et al., 1997). Características: tensão do tubo de 150 kVp, alvo de tungstênio com 22°, filtração de 4,0 mm de berílio, 2,5 mm de alumínio.

Tabela 4.3: Valores das diferenças absolutas médias entre os espectros de raios X simulados com o Geant4 (modelos físicos Low Energy e Penelope) com o seu respectivo espectro de referência.

Espectro da figura	G4 (Low Energy)		G4 (Penelope)	
	Diferença	Dispersão	Diferença	Dispersão
4.1	0,0059(26)	0,0184	0,0057(25)	0,0181
4.2	0,0075(34)	0,0262	0,0075(33)	0,0261
4.3	0,0168(59)	0,0324	0,0166(58)	0,0320
4.4	0,000328(42)	0,000377	0,000199(32)	0,000283
4.5	0,000346(33)	0,000278	0,000473(52)	0,000436
4.6	0,00047(13)	0,00128	0,00078(15)	0,00153
4.7	0,000681(63)	0,000496	0,000654(64)	0,000500
4.8	0,00212(49)	0,00386	0,00280(55)	0,00435
4.9	0,00096(28)	0,00243	0,00142(33)	0,00284

Tabela 4.4: Valores dos rendimentos dos raios X característicos da camada K dos espectros de raios X simulados com o Geant4 e dos espectros de referência.

Espectro da figura	G4 (Low Energy)	G4 (Penelope)	Referência
	Rendimento	Rendimento	Rendimento
4.1	0,06387(49)	0,06703(52)	0,22801
4.2	0,11197(48)	0,11288(50)	0,36400
4.3	0,1236(13)	0,1309(14)	0,4445
4.6	0,03621(15)	0,03394(13)	0,05851
4.7	0,01438(50)	0,01425(64)	0,01981
4.8	0,06407(84)	0,0600(10)	0,1109
4.9	0,07781(18)	0,07458(15)	0,11593

físicos também são bem próximas para cada simulação.

A análise dos rendimentos dos raios X característicos mostra claramente na tabela 4.4 o principal problema dos resultados apresentados nas comparações: a baixa produção desse tipo de radiação nas simulações. Percebe-se que o rendimento dos espectros simulados chega a ser quase quatro vezes menor, conforme pode ser observado nos espectros de mamografia. Essa diferença cai para menos de duas vezes para os espectros com energia na faixa de energia de radiologia diagnóstica. Espectros com alta filtração, como o da figura 4.7 que usa filtração de 5 mm de Cu, apresentam uma grande atenuação da radiação característica e, por isso, essa comparação apresenta rendimentos de raios X característicos compatíveis. Os espectros das figuras 4.4 e 4.5 não apresentam picos de raios X característicos e por isso, não estão listados na tabela.

Na análise das primeiras e segundas camadas semi-redutoras, como mostram as tabelas 4.5

Tabela 4.5: Valores da primeira camada semi-redutora obtidos dos espectros de raios X simulados com o Geant4 e dos espectros de referência.

Espectro da figura	G4 (Low Energy)	G4 (Penelope)	Referência
	1 ^a CSR (mm de Al)	1 ^a CSR (mm de Al)	1 ^a CSR (mm de Al)
4.1	0,253(11)	0,254(11)	0,274(11)
4.2	0,282(13)	0,281(13)	0,320(13)
4.3	0,520(20)	0,528(20)	0,531(18)
4.4	1,323(55)	1,335(55)	1,341(55)
4.5	2,21(12)	2,17(12)	2,26(12)
4.6	3,10(19)	2,93(18)	3,25(20)
4.7	12,88(39)	12,87(39)	12,95(39)
4.8	5,19(25)	4,95(25)	6,01(27)
4.9	4,68(28)	4,31(26)	5,07(28)

Tabela 4.6: Valores da segunda camada semi-redutora obtidos dos espectros de raios X simulados com o Geant4 e dos espectros de referência.

Espectro da figura	G4 (Low Energy)	G4 (Penelope)	Referência
	2 ^a CSR (mm de Al)	2 ^a CSR (mm de Al)	2 ^a CSR (mm de Al)
4.1	0,326(17)	0,329(17)	0,356(17)
4.2	0,371(21)	0,372(21)	0,415(21)
4.3	0,595(31)	0,604(31)	0,579(27)
4.4	1,643(85)	1,655(86)	1,657(85)
4.5	3,20(20)	3,17(20)	3,27(20)
4.6	4,93(30)	4,68(30)	5,10(31)
4.7	12,99(52)	12,99(52)	13,04(53)
4.8	7,41(39)	7,12(38)	8,14(40)
4.9	7,76(42)	7,26(41)	7,99(42)

e 4.6, foi verificado que os valores calculados para os espectros simulados pelos dois modelos do Geant4 são compatíveis com os valores obtidos dos espectros de referência, apesar das diferenças visuais apresentadas anteriormente. A única exceção ocorre para o caso da figura 4.8, provavelmente devido a imprecisão na simulação da filtração inerente do tubo.

O cálculo das energias médias dos espectros obtidos, conforme mostra a tabela 4.7, possibilitou a análise de uma grandeza que, assim como a camada semi-redutora, também é muito usada por laboratórios de pesquisa e hospitais para avaliar espectros de raios X. Do ponto de vista clínico, os valores encontrados se mostraram muito próximos entre si, até mesmo nos espectros com baixa produção de raios X característicos. A razão disso é o fato de ocorrer uma compensação dessa baixa produção com uma maior intensidade de fótons provenientes do processo de bremsstrahlung. Essa análise, junto com os cálculos das camadas semi-redutoras,

Tabela 4.7: Valores das energias médias dos espectros de raios X simulados com o Geant4 e dos espectros de referência. As incertezas do tipo A das energias médias dos espectros simulados com o Geant4 são menores que 0,1%.

Espectro da figura	G4 (Low Energy)	G4 (Penelope)	Referência
	Energia Média (keV)	Energia Média (keV)	Energia Média (keV)
4.1	15,67	15,70	15,99
4.2	16,65	16,72	16,90
4.3	19,22	19,31	18,95
4.4	27,86	27,90	27,90
4.5	38,62	38,57	38,90
4.6	47,91	47,05	48,47
4.7	82,60	82,63	82,91
4.8	56,77	55,71	58,93
4.9	59,94	58,21	60,30

mostra que, apesar das diferenças avaliadas entre os espectros simulados e os de referências, é possível fazer uma excelente estimativa dessas grandezas utilizadas para a caracterização de um espectro de raios X.

Conforme observado, os resultados apresentados apontam para uma proporção menor que a esperada entre a intensidade de raios X característicos e os fótons de *bremstrahlung*. Por isso, para obter resultados mais refinados, um estudo mais preciso e quantitativo sobre a origem dessas discrepâncias causadas pelo pacote Geant4 torna-se necessário. Como a geração dos raios X neste caso é realizada a partir de interações envolvendo elétrons como partículas primárias, sendo o processo de ionização o responsável pela produção dos raios X característicos e o de *bremstrahlung* pela parte contínua dos espectros, deve-se fazer revisões do código e das seções de choque relevantes a esses processos, assim como o processo de relaxação atômica.

Alguns trabalhos (POON; VERHAEGEN, 2005; POON; SEUNTJENS; VERHAEGEN, 2005) já foram publicados com o intuito de testar e validar esses processos, com um estudo da base de dados das seções de choques. Esses trabalhos apresentam diferenças dos modelos Low Energy e Penelope com outras fontes de dados. No entanto, ainda é possível que também existam problemas no código dos modelos utilizados.

É importante também ressaltar que os níveis de discrepâncias encontrados nas comparações dos espectros de raios X simulados com o Geant4 com os espectros de referência também ocorrem em comparações de outras ferramentas computacionais avaliadas por outros trabalhos (AY et al., 2005; MEYER et al., 2004), onde essas ferramentas são baseadas em métodos empíricos, semi-empíricos e no próprio método de Monte Carlo. Tais diferenças nas comparações desses trabalhos não são necessariamente para as mesmas situações apresentadas pelo Geant4,

o que implica a necessidade de conhecer as limitações da ferramenta computacional que vai ser utilizada para a simulação de espectros de raios X. Desta forma, o uso do Geant4 para esta finalidade propicia resultados equivalentes a outras soluções já avaliadas anteriormente, com exceção das limitações apresentadas aqui e que devem ser levadas em consideração quando o mesmo for utilizado.

4.2 Espectros de raios X corrigidos com o auxílio do Geant4

A matriz de resposta do detector CdTe utilizado neste trabalho foi calculada com resolução em energia de 0,2 keV para fótons monoenergéticos incidentes com energia variando de 5 até 155 keV em intervalos de 0,2 keV. As figuras 4.10 e 4.11 mostram representações gráficas em 2d das matrizes de resposta determinadas por meio do procedimento descrito no capítulo 3 para o detector CdTe e nas situações em que o módulo RTD está desligado e ligado, respectivamente. A eficiência do detector para as duas situações é indicada em níveis de tons de cinza nas figuras. Desta forma, é possível visualizar nas duas representações como ocorre a resposta do detector para cada energia de fóton incidente no detector para o módulo RTD ligado e desligado.

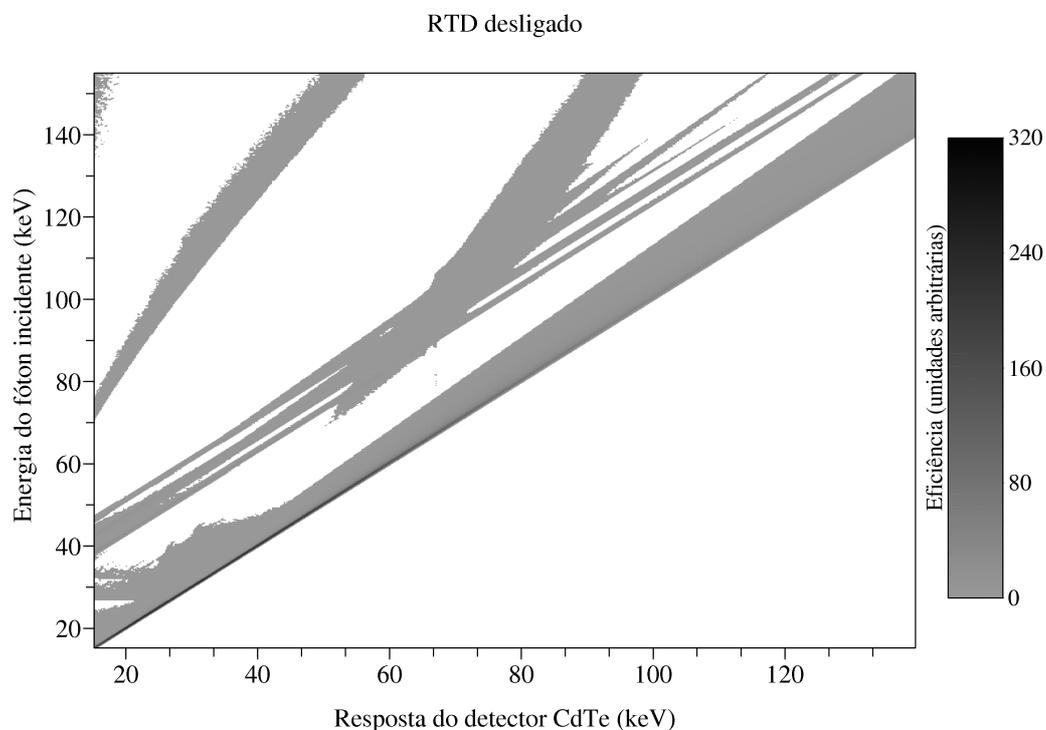


Figura 4.10: Representação gráfica em 2d da resposta do detector CdTe com módulo RTD desligado.

Conforme pode ser observado nos dois gráficos, os fotopicos de maior intensidade, ou seja, os de tons de cinza mais escuros, são os de absorção total e com maior eficiência de coleção de

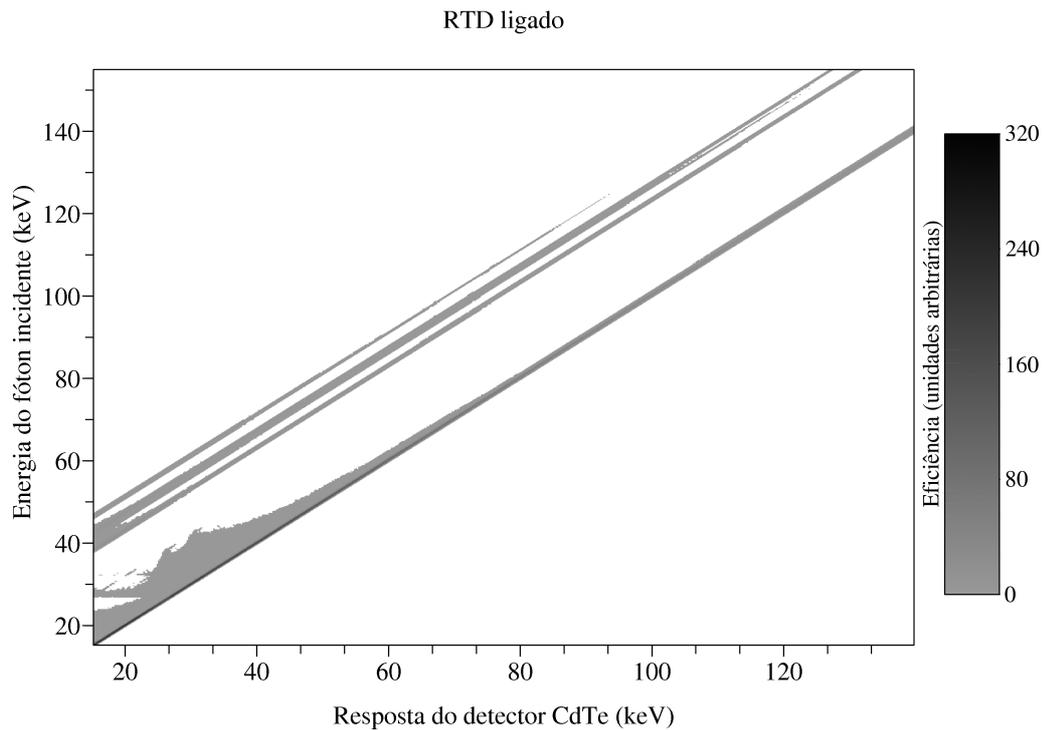


Figura 4.11: Representação gráfica em 2d da resposta do detector CdTe com módulo RTD ligado.

cargas. Para os fótons incidentes com energias superiores a 35 keV começam a se formar picos de energias chamados de picos de escape de raios X. Esses picos são formados quando os fótons de fluorescência do CdTe gerados após um efeito fotoelétrico, onde o fotoelétron é retirado da camada K ou L, não são absorvidos dentro do detector. Desta forma, a energia do pico de escape corresponde à energia do fóton incidente menos a energia do fóton de fluorescência do cádmio ou do telúrio. As diferenças entre os dois gráficos são devido as interações que ocorrem fora da espessura sensível do detector definida quando o módulo RTD está ligado.

As figuras 4.12 e 4.13 exibem representações gráficas em 3d das matrizes de resposta do detector CdTe para algumas energias de fótons incidentes, com o intuito de facilitar a visualização da formação dos espectros de resposta e suas respectivas intensidades.

Conforme pode ser observado no gráfico com o módulo RTD desligado, as caudas dos picos onde a absorção total de energia ocorre se tornam cada vez maiores com o aumento da energia. Esta cauda se forma devido à baixa eficiência de coleção de cargas que ocorre próximo ao ânodo do detector, onde somente fótons de energias mais altas conseguem interagir.

Como era esperado, o gráfico com o módulo RTD ligado não apresenta a formação das caudas. Além disso, é possível verificar nos dois gráficos que a eficiência de detecção diminui conforme a energia do fóton incidente aumenta porque fótons de energias mais altas começam a atravessar a espessura sensível à radiação do detector sem produzir interação. As intensidades

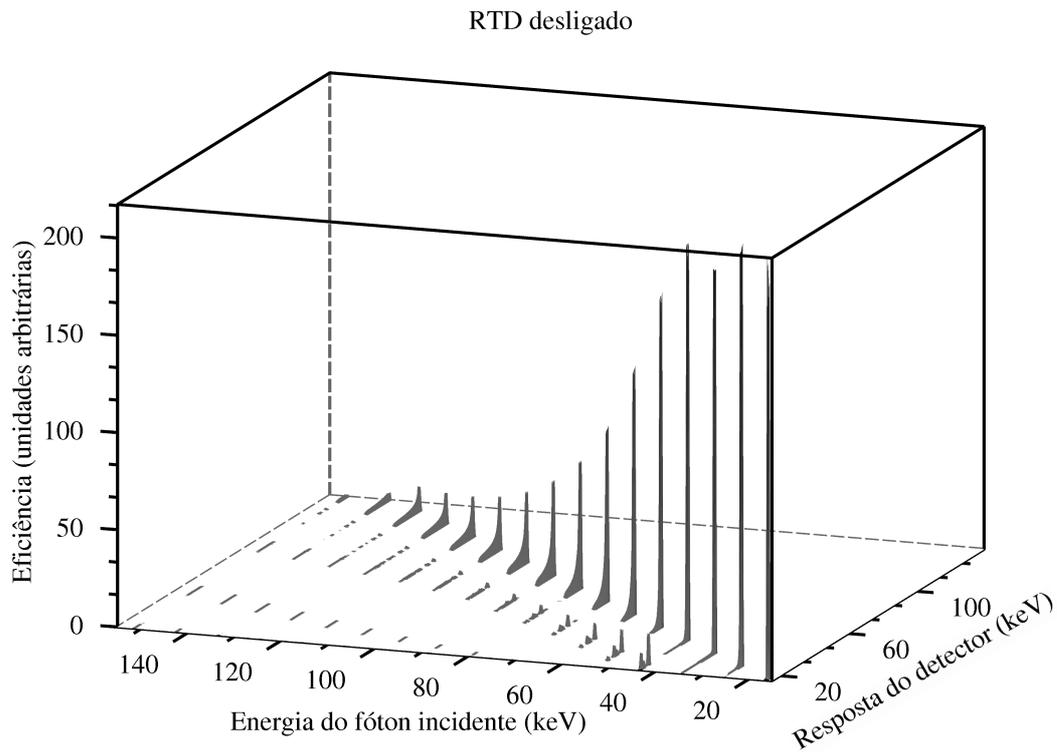


Figura 4.12: Representação gráfica em 3d da resposta do detector CdTe para algumas energias de fótons incidentes no cristal e com o módulo RTD desligado.

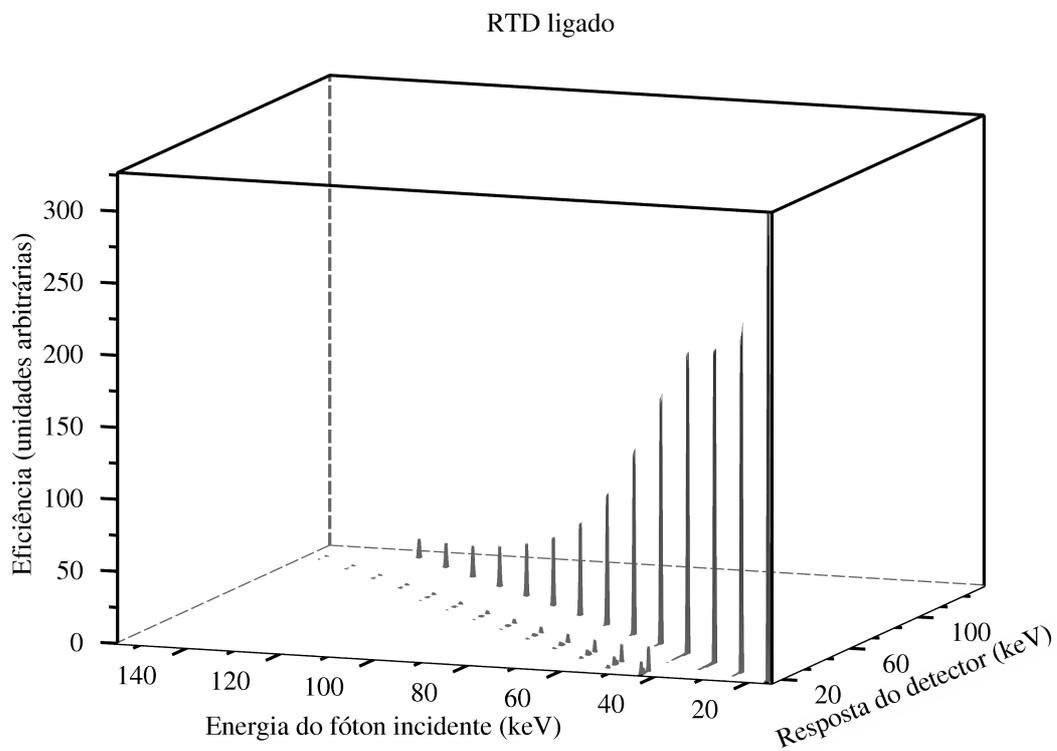


Figura 4.13: Representação gráfica em 3d da resposta do detector CdTe para algumas energias de fótons incidentes no cristal e com o módulo RTD ligado.

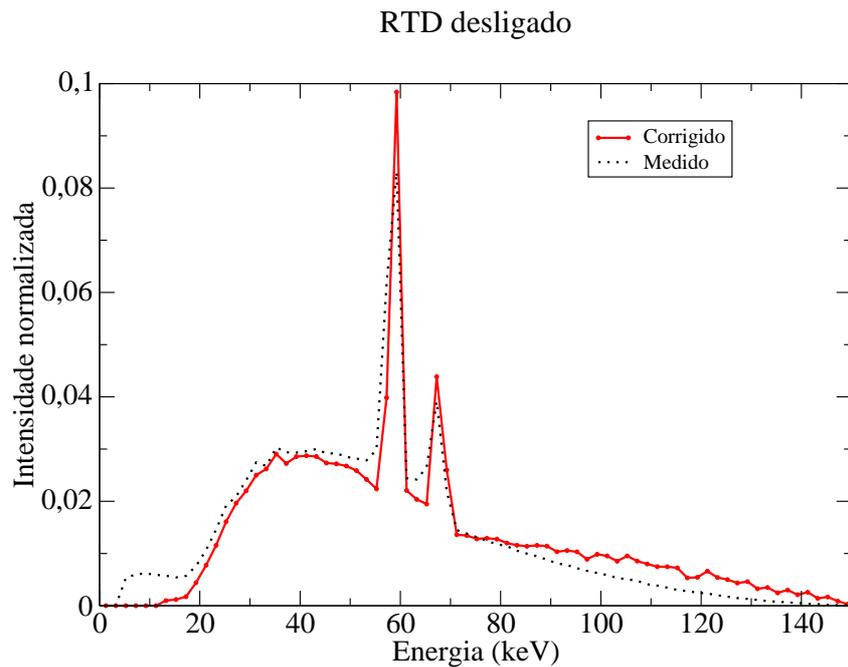


Figura 4.14: Comparação entre espectro medido com o detector CdTe e o mesmo espectro após correção utilizando o Geant4 (modelo Low Energy) com o módulo RTD desligado. Características: tensão do tubo de 150 kVp, alvo de tungstênio com 22° , filtração de 4,0 mm de berílio, 2,5 mm de alumínio.

dos picos de escape de raios X também podem ser visualizadas mais facilmente nesses dois gráficos em 3d do que nas representações gráficas em 2d.

As figuras 4.14 e 4.15 apresentam os espectros de raios X medidos com o detector CdTe e os espectros corrigidos com o procedimento de correção de espectros de raios X descrito no capítulo 3, para as situações em que o módulo eletrônico RTD está ligado e desligado.

As diferenças entre os espectros corrigidos e medidos são evidenciadas pelos patamares devido ao espalhamento Compton presente na região de energias entre 2 e 20 keV dos espectros medidos, que são suprimidos após o processo de correção de espectros. Outra diferença notada são as caudas formadas no espectro medido com o módulo RTD desligado na parte de baixa energia dos picos característicos energia do tungstênio, que não existem no espectro corrigido para a mesma situação.

Os espectros de raios X foram corrigidos conforme os procedimentos apresentados no capítulo anterior. As características dos espectros gerados pelo equipamento de raios X medidos com o detector CdTe estão listadas na tabela 4.8. As combinações escolhidas de tensão aplicada no tubo, material do alvo, ângulo de inclinação do ânodo e filtração adicional foram também simuladas no item anterior para que seja possível fazer uma comparação entre os espectros corrigidos, simulados e de referência.

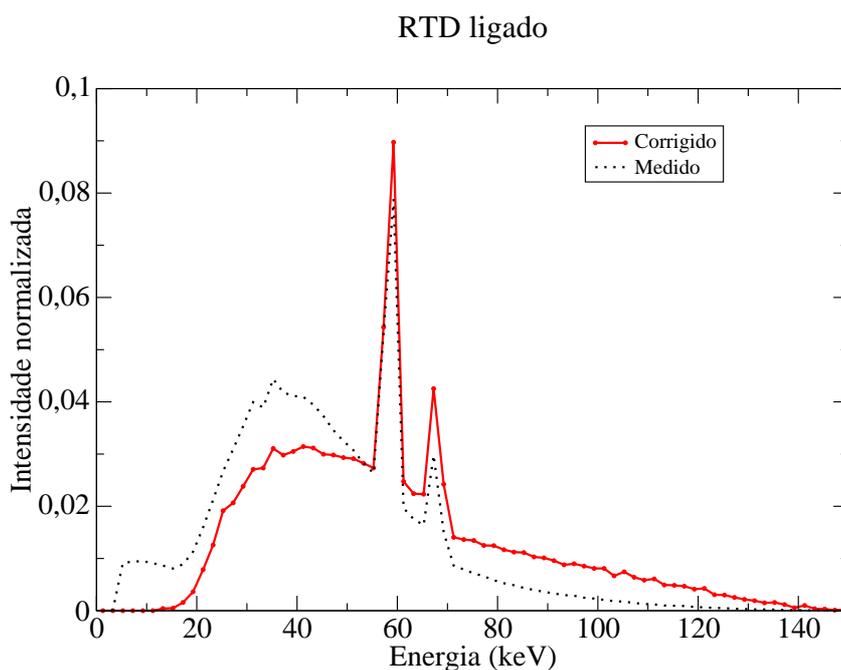


Figura 4.15: Comparação entre espectro medido com o detector CdTe e o mesmo espectro após correção utilizando o Geant4 (modelo Low Energy) com o módulo RTD ligado. Características: tensão do tubo de 150 kVp, alvo de tungstênio com 22°, filtração de 4,0 mm de berílio, 2,5 mm de alumínio.

Foram medidos e corrigidos três espectros com o detector CdTe que compreendem a faixa de energia utilizada em aplicações na radiologia diagnóstica, com tensões de tubo de 70, 100 e 150 kVp. O espectro do tubo com tensão aplicada de 70 kVp e 150 kVp são espectros que possuem pouca filtração, enquanto que o espectro de 100 kVp é um feixe de raios X com uma distribuição de energia mais estreita, por causa de sua alta filtração. Todos os espectros de referência desta etapa foram obtidos do mesmo catálogo de espectro (CRANLEY et al., 1997), os quais foram calculados por um método semi-empírico.

As figuras 4.16, 4.17 e 4.18 mostram as comparações visuais entre os espectros de raios X corrigidos com o auxílio do Geant4 e os espectros de referência. As incertezas das intensidades

Tabela 4.8: Combinação de parâmetros dos espectros medidos com o detector CdTe. A distância do ponto focal do tubo até a região de interesse é de 1 m para todos os espectros.

Espectro da figura	Tensão do tubo (kVp)	Material/ Ângulo do alvo	Filtração		
			Be (mm)	Al (mm)	Cu (mm)
4.16	70	W/22°	4,0	2,5	
4.17	100	W/22°	4,0	2,5	5,0
4.18	150	W/22°	4,0	2,5	

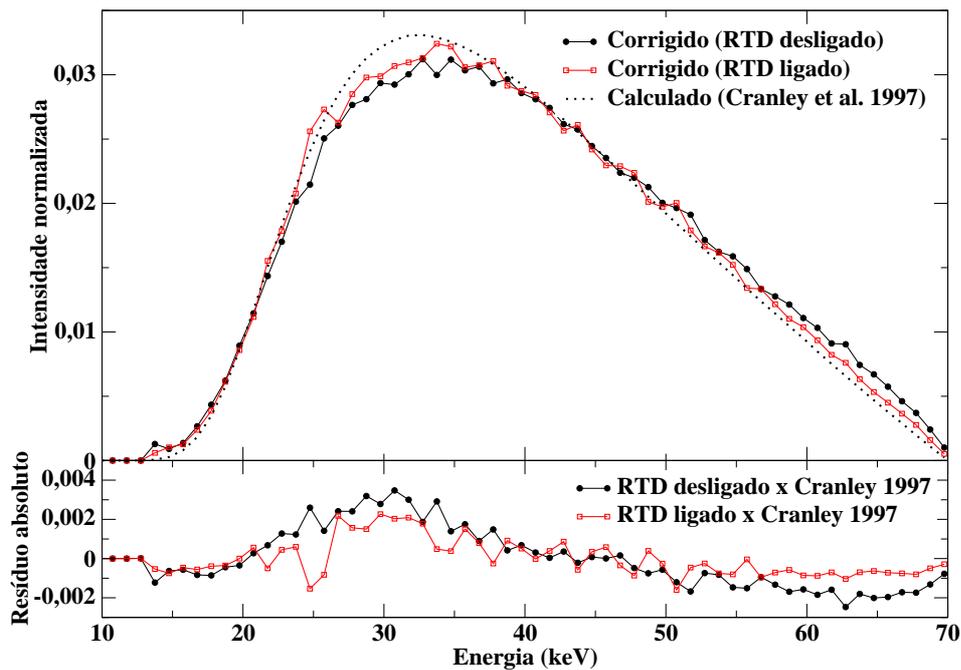


Figura 4.16: Comparação entre espectros medidos com o detector CdTe e corrigidos utilizando o Geant4 (modelo Low Energy) com o módulo RTD ligado e desligado e espectro de referência calculado (CRANLEY et al., 1997). Características: tensão do tubo de 70 kVp, alvo de tungstênio com 22° , filtração de 4,0 mm de berílio, 2,5 mm de alumínio.

de cada canal de energia são menores que os pontos que indicam os seus respectivos valores de intensidade. Os espectros foram corrigidos para as situações em que o módulo RTD do detector CdTe estava ligado e desligado, mostrando bons resultados para ambos os casos. Como pode ser observado nas diferenças relativas de cada comparação, os espectros corrigidos para o detector CdTe com o módulo RTD ligado apresentam um melhor acordo com os espectros de referência do que com o módulo RTD desligado. Além disso, os espectros corrigidos apresentam maiores intensidades nas regiões de mais baixa e de mais alta energia e menores intensidades nas energias intermediárias, em comparação com os espectros de referência. Essa discrepância é mais acentuada para a situação em que o módulo RTD está desligado.

Os espectros da figura 4.16 são de uma faixa de energia onde não ocorre a produção de raios X característicos do tungstênio. Assim, é possível observar o bom acordo para a parte contínua dos espectros corrigidos com o de referência, com os melhores resultados sendo obtidos para a situação em que o módulo RTD do detector está ligado.

Os espectros apresentados nas figuras 4.17 e 4.18 permitem observar as maiores intensidades dos picos de energias dos raios X característicos dos espectros corrigidos em comparação com os espectros de referência, sendo que as maiores diferenças encontradas são novamente para a situação em que o módulo RTD está desligado.

Os espectros corrigidos foram analisados estatisticamente com os cálculos das diferenças

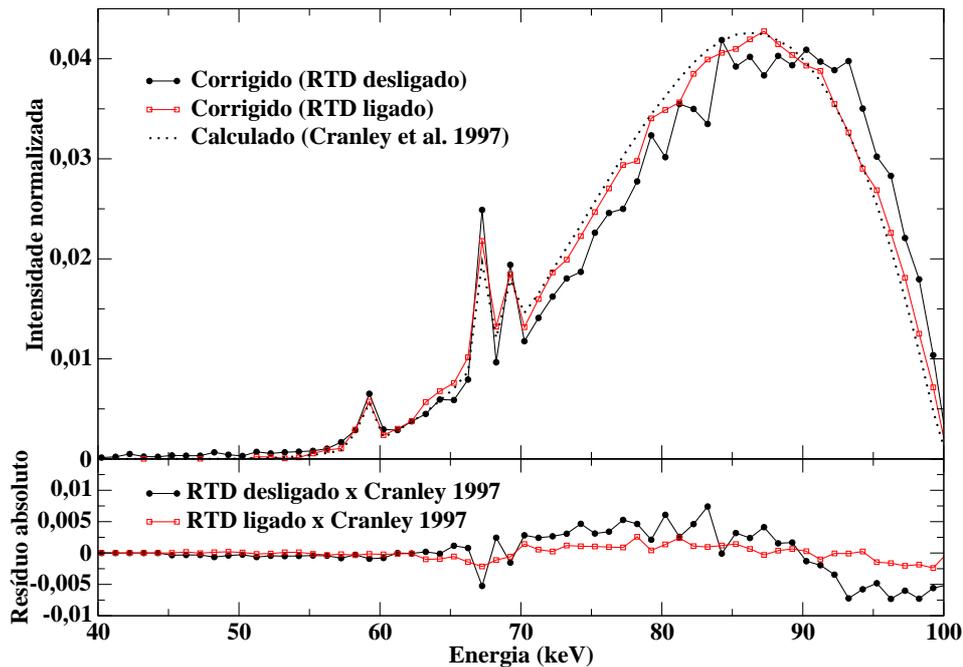


Figura 4.17: Comparação entre espectros medidos com o detector CdTe e corrigidos utilizando o Geant4 (modelo Low Energy) com o módulo RTD ligado e desligado e espectro de referência calculado (CRANLEY et al., 1997). Características: tensão do tubo de 100 kVp, alvo de tungstênio com 22° , filtração de 4,0 mm de berílio, 4,0 mm de alumínio e 5,0 mm de cobre.

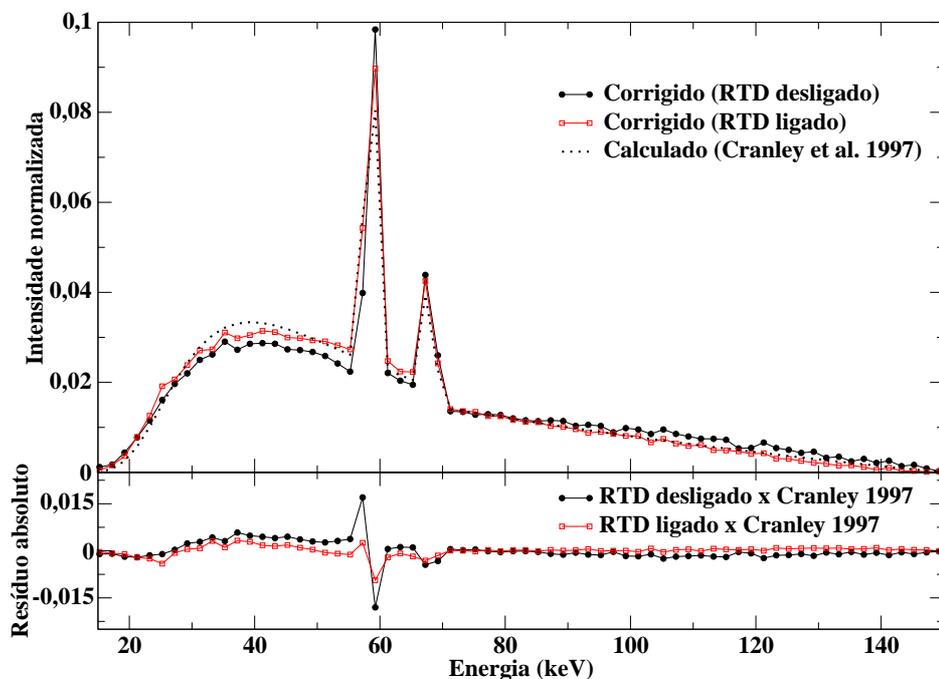


Figura 4.18: Comparação entre espectros medidos com o detector CdTe e corrigidos utilizando o Geant4 (modelo Low Energy) com o módulo RTD ligado e desligado e espectro de referência calculado (CRANLEY et al., 1997). Características: tensão do tubo de 150 kVp, alvo de tungstênio com 22° , filtração de 4,0 mm de berílio, 2,5 mm de alumínio.

Tabela 4.9: Valores das diferenças absolutas médias entre cada um dos espectros corrigidos utilizando o Geant4 (modelo Low Energy) com o seu respectivo espectro de referência. Os espectros corrigidos foram medidos com o detector CdTe nas situações em que o módulo eletrônico RTD está ligado e desligado.

Espectro da figura	RTD desligado		RTD ligado	
	Diferença	Dispersão	Diferença	Dispersão
4.16	0,00106(11)	0,000931	0,000635(69)	0,000576
4.17	0,00231(29)	0,00226	0,000703(89)	0,000695
4.18	0,00197(34)	0,00293	0,000923(15)	0,00134

Tabela 4.10: Valores dos rendimentos dos raios X característicos da camada K dos espectros medidos (módulo eletrônico RTD ligado e desligado) e corrigidos utilizando o Geant4 (modelo físico Low Energy) e os seus respectivos espectros de referência.

Espectro da figura	RTD desligado	RTD ligado	Referência
	Rendimento	Rendimento	Rendimento
4.17	0,02929(35)	0,02373(22)	0,01981
4.18	0,13060(47)	0,12233(49)	0,11593

absolutas médias, onde os resultados dos cálculos são apresentados na tabela 4.9. As maiores diferenças foram encontradas nas comparações com os espectros corrigidos com o módulo RTD desligado e com a presença do picos de energias dos raios X característicos. Os espectros corrigidos com a função RTD ligado foram os que apresentaram menores diferenças.

A tabela 4.10 exhibe os rendimentos dos raios X característicos para cada espectro de raios X. Todos os espectros corrigidos apresentam rendimentos de raios X característicos maiores do que os dos espectros de referência. Os melhores acordos são obtidos com os espectros corrigidos com o módulo RTD ligado, onde as diferenças percentuais, em relação ao espectro de referência, são de 5,52% para o espectro da figura 4.18 e 19,78% para o espectro da figura 4.17. Para as correções com o módulo RTD desligado, as diferenças percentuais são de 12,65% para o espectro da figura 4.18 e 47,85% para o espectro da figura 4.17.

Nas tabelas 4.11 e 4.12 são verificados que os valores calculados das primeiras e segundas camadas semi-redutoras dos espectros corrigidos, tanto para a situação em que o módulo RTD está ligado como para o caso em que o mesmo está desligado, são compatíveis com os respectivos valores calculados dos espectros de referência.

Uma análise da tabela 4.13 permite verificar que os valores calculados das energias médias dos espectros corrigidos estão muito próximos dos valores obtidos dos espectros de referência. As maiores diferenças foram encontradas para os espectros corrigidos do detector CdTe

Tabela 4.11: Valores da primeira camada semi-redutora obtidos dos espectros medidos com o detector CdTe e corrigidos utilizando o Geant4 (modelo Low Energy) com o módulo eletrônico RTD ligado e desligado e dos espectros de referência.

Espectro da figura	RTD desligado	RTD ligado	Referência
	1 ^a CSR (mm de Al)	1 ^a CSR (mm de Al)	1 ^a CSR (mm de Al)
4.16	2,23(13)	2,22(13)	2,26(12)
4.17	12,97(39)	12,95(39)	12,95(39)
4.18	5,00(29)	4,72(27)	5,07(28)

Tabela 4.12: Valores da segunda camada semi-redutora obtidos dos espectros medidos com o detector CdTe e corrigidos utilizando o Geant4 (modelo Low Energy) com o módulo eletrônico RTD ligado e desligado e dos espectros de referência.

Espectro da figura	RTD desligado	RTD ligado	Referência
	2 ^a CSR (mm de Al)	2 ^a CSR (mm de Al)	2 ^a CSR (mm de Al)
4.16	3,41(21)	3,31(20)	3,27(20)
4.17	13,11(53)	13,05(53)	13,04(53)
4.18	8,58(45)	7,81(41)	7,99(42)

com o módulo RTD desligado, onde as diferenças chegaram até no máximo em cerca de 3 keV ou 5% da energia média do respectivo espectro de referência. Os melhores resultados foram novamente para os espectros corrigidos com o detector operando com o módulo RTD ligado, onde as diferenças foram menores que 1 keV e 2% da energia média do respectivo espectro de referência.

Os resultados desta etapa mostraram que o Geant4 simulou com excelente acordo a matriz de resposta do detector CdTe para uso na correção de espectros de raios X medidos com ele. As diferenças encontradas devem ser mais influenciadas pelas simulações dos processos físicos

Tabela 4.13: Valores das energias médias dos espectros medidos com o detector CdTe e corrigidos utilizando o Geant4 (modelo Low Energy) com o módulo eletrônico RTD ligado e desligado e dos espectros de referência. As incertezas do tipo A das energias médias dos espectros corrigidos são menores do que 0,1%.

Espectro da figura	RTD desligado	RTD ligado	Referência
	Energia (keV)	Energia (keV)	Energia (keV)
4.16	39,79	39,25	38,90
4.17	83,49	82,99	82,91
4.18	63,12	59,51	60,30

envolvendo a coleção de cargas dentro do cristal do CdTe do que os processos responsáveis pela criação dos pares elétrons-lacunas, que são fornecidos pelo Geant4. O motivo para essa afirmação é que os resultados indicam que a correção de um espectro medido com um detector CdTe com o módulo RTD ligado é o procedimento onde foi obtido melhor acordo com os espectros de referência, pois o módulo RTD elimina os pulsos de subida mais lentos, cujos efeitos provocados na coleção de cargas são mais difíceis de determinar e simular. Apesar dessa vantagem no uso do RTD para a correção dos espectros medidos, a inclusão desse efeito também ocasiona uma significativa diminuição da eficiência do detector, como mostrado anteriormente. Portanto, é preciso avaliar o comprometimento desses dois fatores para se decidir se o módulo RTD deve ou não deve ser utilizado em determinado experimento.

Desta forma, as dificuldades encontradas para estabelecer uma metodologia para simular a resposta do detector CdTe e de sua eletrônica associada se mostraram um desafio muito grande, devido à dependência existente entre os efeitos envolvidos para a coleção de cargas. Um caminho para a obtenção de um método de correção mais refinado seria a inclusão de um comportamento ainda mais detalhado do campo elétrico dentro do cristal do detector, incluindo os possíveis efeitos de borda presentes nas extremidades do mesmo. O comportamento do campo elétrico simulado neste trabalho corresponde à um campo elétrico uniforme, com exceção de uma melhor aproximação aplicada à região próxima do cátodo do detector, que é onde existe maior influência da eficiência da coleção de cargas na faixa de energia em estudo. No entanto, para se obter resultados mais refinados para as simulações com o RTD desligado, talvez seja necessário incluir o comportamento do campo elétrico na região do ânodo também. Esse detalhamento do campo elétrico tornaria mais realista a caracterização do efeito de coleção de cargas próprio do detector. No entanto, tais efeitos variam consideravelmente para cada cristal, até mesmo de um único fabricante, o que dificulta a obtenção de um modelo padrão de campo elétrico que poderia ser aplicado a qualquer detector CdTe. Desta forma, a equação de Hecht, que considera um campo elétrico uniforme dentro cristal, ainda é o modelo que melhor se adapta a esse tipo de detector.

O modelo da região de transição próxima ao cátodo sugerida neste trabalho pode ser um caminho para se obter melhores resultados de correção com esse detector, porém necessita também de uma análise mais refinada para ser possível avaliar sua influência na formação de um espectro de raios X. A influência dessa região talvez possa ser melhor percebida em faixas de energias mais baixas, como a de mamografia.

Os resultados obtidos neste trabalho também criam a oportunidade para a correção de espectros de energias medidos de tubos de raios X com alvo feito de molibdênio para a faixa de energia de mamografia. Além disso, a mesma metodologia empregada neste trabalho pode ser usada para correção de espectros medidos com detectores do tipo CdZnTe, que possui caracte-

rísticas de coleção de cargas semelhantes ao CdTe. Uma outra aplicação interessante do Geant4 seria a simulação de outros tipos de detectores que não são de estado sólido, como as câmaras de ionização.

A boa qualidade no acordo das comparações dos resultados obtidos nesta etapa, onde os fótons de raios X são as partículas primárias, também reforçam a necessidade da revisão dos processos físicos envolvendo elétrons para a produção de raios X, que foi sugerida na etapa de simulação de tubos de raios X, onde algumas discrepâncias nos picos característicos foram constatadas.

5 *Conclusões*

A validação do Geant4 realizada neste trabalho mostrou algumas das possibilidades de uso desta versátil ferramenta na área de radiologia diagnóstica, permitindo o fechamento de um ciclo para duas aplicações desse código computacional para essa área. Na primeira etapa, os processos físicos eletromagnéticos do Geant4 foram utilizados para simular a produção da radiação de um tubo de raios X, onde os elétrons são considerados as partículas primárias. Na segunda etapa, o código é empregado para simular os espectros de raios X medidos por um determinado detector a partir da radiação proveniente de um tubo de raios X, onde as partículas primárias nesta situação são os fótons de raios X produzidos pelas interações de elétrons com o alvo do ânodo, e a distribuição de energia desses fótons deve obedecer a radiação do tubo de raios X em questão. Desta forma, todos os processos físicos envolvidos na produção e detecção da radiação X na faixa de energia de radiologia diagnóstica foram estudados neste trabalho.

Os resultados da etapa de simulação de espectros de energia produzidos por um equipamento de raios X mostram que o Geant4 pode ser utilizado para esta aplicação com qualidade semelhante às encontradas por outras ferramentas já avaliadas e baseadas em métodos empíricos, semi-empíricos e no próprio método de Monte Carlo. As ressalvas para o uso do Geant4 são para a simulação de espectros de raios X com alvos feitos de molibdênio para a região de energia típica para exames em mamografia, que é a situação onde as diferenças dos rendimentos de raios X característicos dos espectros simulados com os seus respectivos espectros de referência são maiores.

Na etapa de simulação da detecção da radiação X por um detector do tipo CdTe são apresentados resultados com excelentes acordos com os dados de referência, sendo que as diferenças encontradas devem ser mais influenciadas pelos efeitos de armadilhamento de cargas e do comportamento do campo elétrico dentro do cristal do detector, que são específicos para este detector e não fazem parte dos modelos físicos fornecidos pelo Geant4. O comportamento do campo elétrico simulado neste trabalho corresponde à um campo elétrico uniforme, com exceção de uma melhor aproximação aplicada à região próxima do cátodo do detector, que é onde existe maior influência da eficiência da coleção de cargas na faixa de energia em estudo. No entanto, para se obter resultados mais refinados para as simulações com o RTD desligado, tal-

vez seja necessário incluir o comportamento do campo elétrico na região do ânodo também. Desta forma, verifica-se que o Geant4 é uma ferramenta confiável para ser aplicada à obtenção de espectros produzidos por tubos de raios X, desde que o transporte de cargas do detector empregado seja determinado adequadamente. No caso do detector CdTe que foi utilizado neste trabalho, os melhores resultados foram obtidos com o módulo RTD ligado.

Conclui-se também que grandezas importantes para a caracterização de espectros de raios X utilizados em radiologia diagnóstica, como energia média e camada semi-redutora, podem ser estimadas com o auxílio do Geant4 por meio de simulações de espectros de raios X ou ainda com a correção de espectros medidos.

Um dos diferenciais do Geant4 em relação aos outros códigos computacionais de transporte de radiação mais conhecidos é o uso da tecnologia de orientação a objetos, que facilitou a compreensão do código do Geant4 e também o desenvolvimento do código necessário para as simulações deste trabalho. No entanto, foi encontrada uma certa dificuldade na compreensão desta tecnologia, cuja abstração em relação a linguagem estruturada é mais elevada.

Finalmente, é de grande importância para os desenvolvedores e usuários do Geant4 levar em consideração experimentos e detectores de diferentes comunidades científicas (física dos aceleradores, física de partículas, ciências espaciais e física médica) para ser possível verificar a confiabilidade e adequabilidade dos modelos físicos do Geant4 em diferentes faixas de energia e áreas experimentais.

Referências Bibliográficas

- ACOSTA, E. et al. Monte Carlo simulation of bremsstrahlung emission by electrons. *Applied Physics Letters*, v. 80, n. 17, p. 3228–3230, 2002.
- AGOSTINELLI, S. et al. Geant4—a simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 506, p. 250–303, 2003.
- ALLISON, J. et al. Geant4 developments and applications. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, v. 53, p. 270, 2006.
- AMPTEK. *X-ray and gamma ray detector high resolution CdTe cadmium telluride*. Bedford, MA, 2005a. Disponível em: <www.amptek.com>. Acesso em: 21 dez. 2006.
- AMPTEK. *X-Ray Detector for Mammography and Radiology*. Bedford, MA, 2005b. Disponível em: <www.amptek.com>. Acesso em: 21 dez. 2006.
- AY, M. R. et al. Assessment of different computational models for generation of X-ray spectra in diagnostic radiology and mammography. *Medical Physics*, 2005.
- AY, M. R. et al. Monte Carlo simulation of X-ray spectra in diagnostic radiology and mammography using MCNP4C. *Physics in Medicine and Biology*, v. 49, p. 4897–4917, 2004.
- BARÓ, J. et al. PENELOPE: An algorithm for Monte Carlo simulation of the penetration and energy loss of electrons and positrons in matter. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, v. 100, p. 31–46, 1995.
- BERGER, M. J.; HUBBELL, J. H. *XCOM: Photon cross sections on a personal computer*. US, 1987.
- BHAT, M. et al. Diagnostic X-ray spectra: a comparison of spectra generated by different computational methods with a measured spectrum. *Medical Physics*, v. 25, p. 114–120, 1998.
- BHAT, M. et al. Off-axis X-ray spectra: a comparison of Monte Carlo simulated and computed X-ray spectra with measured spectra. *Medical Physics*, v. 26, p. 303–309, 1999.
- BIRCH, R.; MARSHALL, M. Computation of bremsstrahlung X-ray spectra and comparison with spectra measured with a GesLid detector. *Physics in Medicine and Biology*, v. 24, p. 505–517, 1979.
- BIRCH, R.; MARSHALL, M.; ARDRAN, G. M. *Catalogue of Spectral Data for Diagnostic X-Rays*. [S.l.], 1979.
- BLOUGH, M. M. et al. Calculated mammographic spectra confirmed with attenuation curves for molybdenum, rhodium, and tungsten targets. *Medical Physics*, v. 25, p. 1605–1612, 1998.
- BOOCH, G. *Object-oriented analysis and design with applications*. 2°. Boston, MA: Addison-Wesley, 1994.

- BOONE, J. M.; FEWELL, T. R.; JENNINGS, R. J. Molybdenum, rhodium, and tungsten anode spectral models using interpolating polynomials with application to mammography. *Medical Physics*, v. 24, p. 1863–1874, 1997.
- BOONE, M.; SEIBERT, J. A. An accurate method for computer generating tungsten anode X-ray spectra from 30 to 140 kv. *Medical Physics*, v. 24, p. 1661–1670, 1997.
- BRIESMEISTER, J. F. *MCNP – a general Monte Carlo N-particle transport code. version 4C*. Los Alamos, NM, 2000.
- BROWN, F. et al. *MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5*. Los Alamos, NM, 2003. Volume I: Overview and Theory.
- CARDOSO, J. M. R. *Desenvolvimento e Implementação de Algoritmos de Processamento Digital de Impulsos para Aquisição Rápida em Espectrometria Nuclear*. Dissertação (Mestrado) — Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra, Outubro 2001.
- CARRIER, J. F.; ARCHAMBAULT, L.; BEAULIEU, L. Validation of Geant4, an object-oriented Monte Carlo toolkit, for simulations in medical physics. *Medical Physics*, v. 31, p. 484–492, 2004.
- CERN. *Geant4 Physics Reference Manual*. Switzerland, 2006a. Versão: Geant4 8.0. Disponível em: <<http://cern.ch/geant4>>. Acesso em: 21 jun. 2006.
- CERN. *Geant4 User's Guide – For Application Developers*. Switzerland, 2006b. Versão: Geant4 8.0. Disponível em: <<http://cern.ch/geant4>>. Acesso em: 21 jun. 2006.
- CRANLEY, K. et al. *IPEM Report 78: Catalogue of Diagnostic X-ray Spectra and Other Data*. Reino Unido, 1997.
- CULLEN, D. E.; HUBBELL, J. H.; KISSEL, L. *EPDL97: the Evaluated Photon Data Library*. Livermore, CA, 1997. UCRL-50400-V.6-REV.5.
- DOOLEN, G. D.; HENDRICKS, J. Monte Carlo at work. *Los Alamos Science Special Issue*, p. 142–143, 1987.
- EISEN, Y.; HOROVITZ, Y. Correction of incomplete charge collection in CdTe detectors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 353, p. 60–66, 1994.
- FANO, U. Ionization yield of radiations, ii. the fluctuation of the number of ions. *Physical Review*, v. 72, n. 1, p. 26–29, 1947.
- FEWELL, T. R.; SHUPING, R. E. Photon energy distribution of some typical diagnostic x-ray beams. *Medical Physics*, v. 4, n. 506, p. 187–197, 1977.
- FEWELL, T. R.; SHUPING, R. E. *Handbook of Mammography Spectra*. Washington, DC, 1978. HEW Publication.
- FEWELL, T. R.; SHUPING, R. E.; HEALY, K. E. *Handbook of Computed Tomography X-ray Spectra*. Washington, DC, 1981. HHS Publication.
- FINK, J. et al. Characterization of charge collection in CdTe and CZT using the transient current technique. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 560, p. 435–443, 2006.

- FOUGERES, P. et al. CdTe and CdZnTe for nuclear detectors: facts and fictions. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 428, p. 38–44, 1999.
- FUNAKI, M. et al. Growth and characterization of CdTe single crystals for radiation detectors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 436, p. 120–126, 1999.
- HALBLEIB, J. A. et al. *ITS Version 3.0: The Integrated TIGER, series of coupled Electron/Photon Monte Carlo Transport Codes*. Livermore, CA, 1992.
- HAMAMATSU. *Silicon Photodiodes and Charge Sensitive Amplifiers for Scintillation Counting and High Energy Physics*. Japan, june 1993.
- HELENE, O.; MORALLES, M. Comparison of two methods for relocation of multichannel spectra. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 378, p. 624–626, 1996.
- ICRU. *ICRU Report 60 - Fundamental quantities and units for ionizing radiation*. Bethesda, MD, 1998.
- ISO. *ISO 4037-1 - X and gamma reference radiation for calibrating dosimeters and dose rate meters and for determining their response as a function of photon energy - Part 1: Radiation characteristics and production methods*. Geneva, 1996.
- IVANCHENKO, V. Geant4: physics potential for instrumentation in space and medicine. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 525, p. 402–405, 2004.
- JOHNS, H. E.; CUNNINGHAM, J. R. *The Physics of Radiology*. 4th ed.. ed. [S.l.]: Charles C Thomas Publisher, 1983.
- JORDANOV, V.; PANTAZIS, J.; HUBER, A. Compact circuit for pulse rise-time discrimination. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 380, p. 353–357, 1996.
- JUNG, M. et al. A new method for evaluation of transport properties in CdTe and CZT detectors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 428, p. 45–57, 1999.
- KNOLL, G. F. *Radiation Detection and Measurement*. 3°. NY: John Wiley & Sons, Inc., 1999.
- KOSYACHENKO, L. A.; MASLYANCHUK, O. L. Efficiency spectrum of a CdTe X- and gamma ray detector with a schottky diode. *Physica Status Solidi*, v. 2, n. 3, p. 1194–1199, 2005.
- KRAMER, H. A. On the theory of X-ray absorption and of the continuous X-ray spectrum. *Philosophical Magazine*, v. 46, p. 836–871, 1923.
- KÜNZEL, R. et al. X-ray spectroscopy in mammography with a silicon PIN photodiode with application to the measurement of tube voltage. *Medical Physics*, v. 31, n. 11, p. 2996–3003, 2004.
- LIMOUSIN, O. New trends in CdTe and CdZnTe detectors for X- and gamma-ray applications. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 504, p. 24–37, 2003.
- LUTZ, G. *Semiconductor radiation detector: device physics*. Berlin: Springer-Verlag, 1999.
- MAEDAA, K. et al. Compton-scattering measurement of diagnostic X-ray spectrum using high-resolution Schottky CdTe detector. *Medical Physics*, v. 32, p. 1542–1548, 2005.

- MANFREDOTTI, C. et al. Investigation on the electric field profile in CdTe by ion beam induced current. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 380, p. 136–140, 1996.
- MAVUNDA M. ASSIAMAH, T. N. R.; KEDDY, R. Bremsstrahlung spectra from diagnostic X-rays. *Radiation Physics and Chemistry*, v. 71, p. 991–992, 2004.
- MERCIER, J. R. et al. Modification and benchmarking of MCNP for low-energy tungsten spectra. *Medical Physics*, v. 27, p. 2680–2687, 2000.
- METROPOLIS, N.; ULAM, S. The Monte Carlo method. *J. Amer. Statistical Assoc.*, v. 44, p. 335–341, 1949.
- MEYER, P. et al. Evaluation of the use of six diagnostic X-ray spectra computer codes. *The British Journal of Radiology*, 2004.
- MIYAJIMA, S. Thin CdTe detector in diagnostic X-ray spectroscopy. *Medical Physics*, v. 30, p. 771–777, 2003.
- MIYAJIMA, S.; IMAGAWA, K. CdZnTe detector in diagnostic X-ray spectroscopy. *Medical Physics*, v. 29, p. 1421–1429, 2002a.
- MIYAJIMA, S.; IMAGAWA, K. CdZnTe detector in mammographic X-ray spectroscopy. *Physics in Medicine and Biology*, v. 47, p. 3959–3972, 2002b.
- MORALLES, M. et al. Monte Carlo and least squares methods applied in unfolding of X ray spectra measured with cadmium telluride detectors. In: *10. International Symposium on Radiation Physics*. Coimbra-Portugal: [s.n.], 2006. Aceito para publicação no periódico Nuclear Instruments and Methods Section A.
- MORHÁC, M. Deconvolution methods and their applications in the analysis of [gamma]-ray spectra. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 559, p. 119–123, 2006.
- NELSON, W. R.; HIRAYAMA, H.; ROGERS, D. W. O. The EGS4 code system. *SLAC-265*, 1985. Stanford Linear Accelerator Center.
- NG, C. S. K. K. P.; TANG, F. H. Monte Carlo simulation of X-ray spectra in mammography. *Physics in Medicine and Biology*, v. 45, p. 1309–1318, 2000.
- OWENS, A. et al. The X-ray response of CdZnTe. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 484, p. 242–250, 2001.
- OWENS, A. et al. The X-ray response of CdZnTe. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 484, p. 242–250, 2002.
- PERKINS, S.; CULLEN, D.; SELTZER, S. *Tables and graphs of Electron-Interaction Cross-Sections from 10 eV to 100 GeV Derived from the LLNL Evaluated Electron Data Library (EEDL), Z=1-100*. Livermore, CA, 1997. UCRL-50400-V.31.
- PERKINS, S. T. et al. *Tables and Graphs of Atomic Subshell and Relaxation Data Derived from the LLNL Evaluated Atomic Data Library (EADL), Z=1-100*. Livermore, CA, 1997. UCRL-50400-V.30.

- POON, E.; SEUNTJENS, J.; VERHAEGEN, F. Consistency test of the electron transport algorithm in the Geant4 Monte Carlo code. *Physics in Medicine and Biology*, v. 50, p. 681–694, 2005.
- POON, E.; VERHAEGEN, F. Accuracy of the photon and electron physics in Geant4 for radiotherapy applications. *Medical Physics*, v. 32, p. 1696–1711, 2005.
- PRESSMAN, R. *Engenharia de Software*. 5°. São Paulo, SP: McGraw Hill, 2002.
- RATH, S. et al. Microscopic evaluation of spatial variations in material and charge transport properties of CdZnTe radiation detectors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 512, p. 427–432, 2003.
- REDUS, R. *Efficiency of Amptek XR-100T-CdTe and -CZT Detectors*. Bedford, MA, 2002.
- REDUS, R. *Charge Trapping in XR-100T-CdTe and -CZT Detectors*. Bedford, MA, 2003.
- REDUS, R. et al. Electronics for high resolution spectroscopy with compound semiconductors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 380, p. 312–317, 1996.
- REDUS, R. et al. Improved sensitivity X-ray detectors for field applications. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, v. 49, n. 6, p. 3247–3253, 2002.
- REDUS, R. et al. Multielement CdTe stack detectors for gamma-ray spectroscopy. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, v. 51, n. 5, p. 2386–2394, 2004.
- SALVAT, F. et al. PENELOPE: A code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport. In: OECD NUCLEAR ENERGY AGENCY,. *Workshop Proceedings*. Issyles-Moulineaux, 2001.
- SEELENTAG, W. W.; PANZER, W. Stripping of X-ray bremsstrahlung spectra up to 300 kv_p on a desk type computer. *Physics in Medicine and Biology*, v. 24, n. 4, p. 767–780, 1979.
- SELTZER, S. M.; HUBBELL, J. H. *Tables of X-Ray Mass Attenuation Coefficients and Mass Energy-Absorption Coefficients (version 1.4)*. Gaithersburg, MD, 2004. Disponível em: <<http://physics.nist.gov/xaamdi>>. Acesso em: 21 jan. 2007.
- SHOCKLEY, W.; READ, W. Statistics of the recombinations of holes and electrons. *Physical Review*, v. 87, n. 5, p. 835–842, 1952.
- SOBOL, I. *O método de Monte Carlo*. Moscou: Ed. Mir, 1983.
- SÜKÖSD, C. et al. Spectrum unfolding in high energy gamma-ray detection with scintillation detectors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 355, p. 552–558, fev. 1995.
- TAKAHASHI, T. et al. High-resolution schottky CdTe Diode detector. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, v. 49, n. 3, p. 1297–1303, 2002.
- TAKIYA, C. et al. Minimum variance regularization in linear inverse problems. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 523, p. 186–192, maio 2004.
- TÁVORA, L. M. N.; MORTON, E. J. Photon production using a low energy electron expansion of the EGS4 code system. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, v. 143, p. 253–271, 1998.

TONEY, J. et al. Optimal bandgap variants of $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ for high-resolution x-ray and gamma-ray spectroscopy. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 428, p. 14–24, 1999.

TSAI, S. P.; MUCCILOLO, E. R.; HELENE, O. Relocation of multichannel spectra. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 345, p. 538–540, 1994.

TUCKER, D. M.; BARNES, G. T.; CHAKRABORTY, D. P. Semiempirical model for generating tungsten target X-ray spectra. *Medical Physics*, v. 18, p. 211–218, 1991.

TUCKER, D. M.; BARNES, G. T.; WU, X. Z. Molybdenum target X-ray spectra: A semiempirical model. *Medical Physics*, v. 18, p. 402–407, 1991.

URBÁN, L. Multiple scattering model in Geant4. In: *CERN Open 70*. Switzerland: [s.n.], 2002.

VITTONI, E. et al. A simulation of a CdTe gamma ray detector based on collection efficiency profiles as determined by lateral IBIC. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 428, p. 81–87, 1999.

WILKINSON, L. E.; JOHNSTON, P. N.; HEGGIE, J. C. A comparison of mammography spectral measurements with spectra produced using several different mathematical models. *Physics in Medicine and Biology*, v. 46, p. 1575–1589, 2001.

ZAHRAMAN, K. et al. Study of the thickness of the dead layer below electrodes, deposited by electroless technique, in CdTe nuclear detectors. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, v. 53, p. 378, 2006.