

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
CURSO DE ENGENHARIA FÍSICA

LEONARDO ZORTEA

**DETECÇÃO DE RADIAÇÃO GAMA COM IODETO DE SÓDIO DOPADO
COM TÁLIO**

SÃO CARLOS
2024

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
CURSO DE ENGENHARIA FÍSICA

LEONARDO ZORTEA

**DETECÇÃO DE RADIAÇÃO GAMA COM IODETO DE SÓDIO DOPADO
COM TÁLIO**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia da Universidade Federal de São Carlos, para obtenção do título/grau de bacharel em Engenharia Física

Orientação: Prof. Dr. Fabio Luis Zabotto

São Carlos
2024

[VERSO DA FOLHA DE ROSTO]

Leonardo, Zortea

Detecção de Radiação Gama com Iodeto de Sódio
Dopado com Tálcio / Zortea Leonardo -- 2025.
55f.

TCC (Graduação) - Universidade Federal de São Carlos,
campus São Carlos, São Carlos

Orientador (a): Fabio Luis Zabotto

Banca Examinadora: Fabio Luis Zabotto, Fernando M.
Araujo-Moreira, Pedro Carlos Russo Rossi

Bibliografia

1. Fundamentação dos mecanismos de detecção de
radiação gama com o cintilador cristalino inorgânico
iodeto de sódio dopado com tálcio (NaI:Tl).. I. Leonardo,
Zortea. II. Título.

Ficha catalográfica desenvolvida pela Secretaria Geral de Informática
(SIn)

DADOS FORNECIDOS PELO AUTOR

Bibliotecário responsável: Arildo Martins - CRB/8 7180

LEONARDO ZORTEA

**DETECÇÃO DE RADIAÇÃO GAMA COM IODETO DE SÓDIO DOPADO
COM TÁLIO**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia da Universidade Federal de São Carlos, para obtenção do título/grau de bacharel em Engenharia Física.

Universidade Federal de São Carlos.
São Carlos, 19 de fevereiro de 2025

Orientador(a)

Prof. Dr. Fabio Luis Zabotto
Universidade Federal de São Carlos

Examinador(a)

Dr. Eng. Fernando M. Araujo-Moreira
Instituto Militar de Engenharia

Examinador(a)

Dr. Pedro Carlos Russo Rossi
Universidade Federal do ABC

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho aos meus pais Delci C. Z., José Arnaldo Z. e meu irmão João V. Z., além de Fefs, Julia G., Vinícius T., Lucas A., Carlos, Kadioba, Julia K., Xavier, Emanuel, Guilherme P. e Bedin pelo estimado apoio e amizade.

AGRADECIMENTO

Este trabalho não teria sido possível sem a oportunidade que o Dr. Eng. Fernando M. Araujo-Moreira me ofereceu de estagiar no projeto PDI-DQBRN, no qual pude direcionar meu foco para o meu principal interesse, a Engenharia Nuclear. Agradeço também ao Dr. Pedro Carlos Russo Rossi pela sua valiosa orientação e paciência no ensino do uso do método de Monte Carlo por meio do código MCNP. Por fim, agradeço ao Cel. Dr. Marcos Paulo Cavaliere de Medeiros e ao Instituto Militar de Engenharia (IME) pela orientação e simulação com MCNP do experimento proposto neste trabalho.

RESUMO

ZORTEA, Leonardo. *Detecção de Radiação Gama com Iodeto de Sódio Dopado com Tálcio*. 2025. 55 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Física) – Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2025.

O iodeto de sódio dopado com tálcio (NaI:Tl) é amplamente utilizado na detecção de radiação gama devido à sua elevada eficiência de cintilação e versatilidade. Este trabalho apresenta uma análise detalhada da detecção de radiação gama com NaI(Tl), combinando uma fundamentação teórica abrangente e simulações computacionais baseadas no método de Monte Carlo. Foram investigados parâmetros como razão pico-total, resolução energética e resposta espectral, considerando diferentes dimensões do cristal. Os resultados obtidos mostraram concordância com as previsões teóricas discutidas ao longo do estudo, proporcionando uma contribuição significativa para a compreensão dessa importante tecnologia.

Palavras-chave: NaI(Tl). Cintilação em cristais inorgânicos. Detectores de radiação. Simulação de Monte Carlo.

ABSTRACT

Thallium-doped sodium iodide (NaI:Tl) is widely used for gamma radiation detection due to its high scintillation efficiency and versatility. This work presents a detailed analysis of gamma radiation detection using NaI(Tl), combining comprehensive theoretical foundations with computational simulations based on the Monte Carlo method. Parameters such as peak-total ratio, energy resolution, and spectral response were investigated, considering different crystal dimensions. The results obtained showed agreement with the theoretical predictions discussed throughout the study, providing significant contributions to the understanding of this important detection technology.

Keywords: NaI(Tl). Scintillation in inorganic crystals. Radiation detectors. Monte Carlo simulation.

LISTA DE FIGURAS

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Diagrama de espectro de ondas eletromagnéticas.....	12
Figura 2: Espalhamento Compton.....	17
Figura 3: Circuito equivalente de entrada de sinal do detector.....	19
Figura 4: (a) Sinal hipotético de um detector. (b) Sinal de circuito para τ pequeno. (c) Sinal de circuito para τ grande.....	20
Figura 5: Definição de resolução energética.....	22
Figura 6: Bandas de energia de um cristal imperfeito.....	28
Figura 7: Relação entre energia da radiação incidente e a resposta luminosa do NaI(Tl).....	30
Figura 8: Regiões de dominação de interação de radiação gama.....	31
Figura 9: Resposta esperada num cristal de tamanho intermediário.....	33
Figura 10: Diagrama de funcionamento básico de tubo fotomultiplicador.....	34
Figura 11: Estrutura cúbica de face centrada para NaI.	37
Figura 12: Tabela com propriedades de cintiladores inorgânicos.....	38
Figura 13: Espectro de emissão de alguns cristais inorgânicos em comparação com alguns tubos fotomultiplicadores (PMT) comerciais.....	40
Figura 14: Diagrama da geometria da simulação.....	45
Figura 15: Resposta do cristal de NaI(Tl) para: a) cristal pequeno e b) cristal intermediário.....	46
Figura 16: Isolamento da gaussiana do fóto pico do cristal pequeno.....	47
Figura 17: Resposta de duplo pico com NaI(Tl) para: a) cristal pequeno e b) cristal intermediário.....	48

LISTA DE ABREVIATURAS, SIGLAS E SÍMBOLOS

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

MCNP	Método de Monte Carlo N-Partículas
NaI(Tl)	Iodeto de sódio dopado com tálio
MgO	Óxido de Magnésio
SrI ₂ (Eu)	Iodeto de Estrôncio dopado com Európio
LaCl ₃ (Ce)	Cloreto de Lantânio dopado com Cério
CsI(Tl)	Iodeto de Césio dopado com Tálio
GSO	Ortosilicato de Gadólio dopado com Cério
YAP	Ortoaluminato de Ítrio dopado com Cério
BGO	Germanato de Bismuto
LYSO	Ortosilicato de Lutécio e Ítrio dopado com Cério
FWHM	Largura Total na Metade do Máximo do Pico

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	11
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	12
2.1 RADIAÇÃO ELETROMAGNÉTICA.....	12
2.1.1 Radioatividade.....	13
2.1.2 Fontes de Radiação Eletromagnética.....	14
2.1.3 Interação com a Matéria.....	15
2.1.3.1 Espalhamento Compton.....	16
2.1.3.2 Efeito Fotoelétrico.....	17
2.1.3.3 Produção de Pares.....	18
2.2 DETECÇÃO DE RADIAÇÃO.....	18
2.2.1 Modo de Pulso.....	19
2.2.2 Resolução Energética.....	20
2.2.3 Eficiência do Detector.....	23
2.2.4 Tempo Morto.....	24
2.3 CRISTAIS CINTILANTES INORGÂNICOS.....	24

2.3.1 Estrutura de Cristais.....	26
2.3.2 Fenômeno de Cintilação.....	27
2.3.3 Formato do Cristal.....	29
2.3.4 Resposta Esperada e Tamanho.....	29
2.4 TUBO FOTOMULTIPLICADOR.....	34
2.5 MÉTODO DE MONTE CARLO N-PARTÍCULAS.....	35
3 MATERIAIS E METODOLOGIA.....	36
3.1 IODETO DE SÓDIO DOPADO COM TÁLIO (NaI:Tl).....	36
3.1.1 Estrutura do NaI(Tl).....	36
3.1.2 Propriedades do NaI(Tl).....	38
3.1.3 Crescimento e Montagem de NaI(Tl).....	41
3.2 SIMULAÇÃO MCNP DE IODETO DE SÓDIO DOPADO COM TÁLIO.....	43
3.2.1 Objetivos.....	43
3.2.2 Descrição da Simulação.....	43
3.2.3 Considerações sobre a Simulação de Detectores.....	44
4 RESULTADOS.....	46

5 DISCUSSÃO DE RESULTADOS.....	49
6 CONCLUSÃO.....	51
6.1 TRABALHOS FUTUROS.....	51
REFERÊNCIAS.....	52
APENDICE – A.....	55
APENDICE – B.....	57

1 INTRODUÇÃO

O iodeto de sódio dopado com tálio (NaI(Tl)) é o cintilador mais amplamente utilizado em espectroscopia de radiação gama, consolidando-se no século XX devido à sua alta eficiência luminosa, boa transparência óptica e compatibilidade com tubos fotomultiplicadores. Sua elevada performance, aliada ao baixo custo de produção, permite aplicações diversificadas, como monitoramento ambiental, segurança nuclear, geração de imagens médicas (KNOLL, 2010) e pesquisas em física nuclear, atômica (BIRKS, 1964) e astrofísica (SUERFU, 2020).

Este trabalho busca apresentar os fundamentos teóricos essenciais para a compreensão da simulação e dos principais mecanismos envolvidos na detecção de radiação utilizando cristais inorgânicos. O enfoque central é o NaI(Tl) devido à sua posição predominante na detecção de radiação gama e seu potencial para futuras aplicações. Na fundamentação teórica, serão abordadas as principais fontes e interações da radiação gama, bem como os princípios da detecção de radiação e da cintilação em cristais inorgânicos, além dos fundamentos do método de simulação MCNP.

Com base nesses conceitos, será analisado o desempenho do detector, considerando aspectos como eficiência, resolução energética e o estudo do espectro de uma fonte radioativa. Estas informações fornecerão elementos importantes para a compreensão do papel prático e científico da simulação na verificação do funcionamento de detectores de radiação.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 RADIAÇÃO ELETROMAGNÉTICA

Radiação eletromagnética é o termo que descreve o transporte de energia por meio das oscilações transversais de campos elétricos e magnéticos perpendiculares entre si e à direção de propagação. A energia transportada por este mecanismo tem tanto caráter ondulatório (onda eletromagnética) quanto corpuscular (fóton), o que reflete nas suas propriedades. Nesse sentido, esta categoria de radiação é definida como desprovida de carga e por uma relação entre energia e frequência de oscilação.

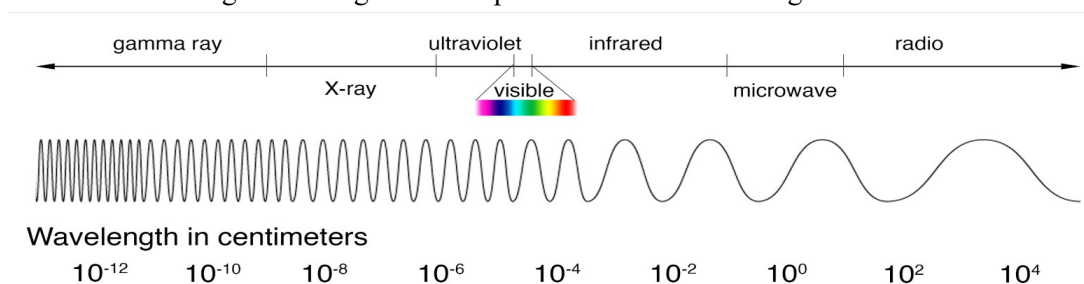
A energia (E) transportada por um fóton é caracterizada pela relação:

$$E = h \cdot f, \quad (1)$$

em que h é a constante de Planck ($6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ ou $4,135 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s}$) e f é a frequência (Hertz). Apesar do Joule ser a unidade de energia do Sistema Internacional (SI), a unidade tradicional da física nuclear é o elétron-volt (eV), definida como a energia cinética obtida por um elétron quando submetido a uma diferença de potencial de 1 volt (KNOLL, 2010).

Diferentes tipos de radiação eletromagnéticas foram categorizadas pelas particularidades que emergem da sua frequência. A Fig. 1 ilustra a classificação dos fótons a partir do comprimento de onda (λ), que se relaciona com a frequência por meio de $f = c/\lambda$, sendo c a velocidade da luz ($299\,792\,458 \text{ m/s}$).

Figura 1: Diagrama de espectro de ondas eletromagnéticas.



Fonte: Nasa, 2013

Para o trabalho em curso, são de interesse os raios Gama e os Raios-X. As ondas gama tem origem, principalmente, no núcleo atômico, enquanto os raios X são produtos de transições nos orbitais eletrônicos do átomo.

2.1.1 Radioatividade

Um núcleo atômico genérico é composto por um aglomerado de prótons e nêutrons, que são mantidos coesos por uma força nuclear forte que gera uma energia de ligação. Dependendo do número de cada partícula fundamental em uma combinação, é possível que o núcleo seja estável ou instável. Quanto mais instável um núcleo, menor é o tempo em que este é capaz de se manter agregado. Quando ocorre uma mudança no estado de energia de um núcleo instável, este pode passar por um processo de transmutação para outro elemento ou manter sua identidade original. Este fenômeno é chamado de **decaimento radioativo** (KNOLL, 2010).

Com uma amostra suficientemente grande para permitir uma análise estatística, é possível definir a **atividade** de um radioisótopo. A atividade, que mede a taxa de desintegração nuclear ao longo do tempo, segue a lei fundamental do decaimento radioativo:

$$-\left. \frac{dN}{dt} \right|_{\text{decaimento}} = \lambda \cdot N, \quad (2)$$

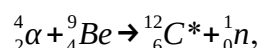
em que N é o número de núcleos de certo radioisótopo e λ é a sua constante de decaimento (KNOLL, 2010). Historicamente a atividade era representada em unidades de Curie (Ci), definida como a atividade de 1 grama de ^{226}Ra . No entanto, a unidade padrão no Sistema Internacional é o Becquerel (Bq), correspondente a uma desintegração por segundo.

2.1.2 Fontes de Radiação Eletromagnética

A radiação eletromagnética é gerada pela aceleração de cargas elétricas, o que resulta em variações nos campos elétrico e magnético diferentes das observadas em uma carga em movimento uniforme. Essas variações geram perturbações que se propagam radialmente, partindo da carga e se estendendo até o infinito, com intensidade máxima nas direções perpendiculares à aceleração da carga. Não há propagação de radiação na direção do vetor de aceleração.

As principais fontes de radiação de alta energia, como os **Gama** e **Raios-X**, originam-se de transições no núcleo atômico ou de mudanças nos níveis eletrônicos, onde a aceleração das cargas ainda é um fator essencial, embora o caráter da radiação seja distinto. A seguir, são detalhadas as principais fontes destas radiações de interesse à este trabalho, baseado no livro KNOLL (2010):

- **Decaimento Beta:** Em algumas circunstâncias, o decaimento beta resulta em um núcleo produto que permanece em estado excitado. Para alcançar seu estado fundamental, esse núcleo libera energia na forma de radiação gama. Esse fenômeno é particularmente relevante para a calibração de detectores, além de possuir diversas aplicações acadêmicas e industriais. Um exemplo notável é o isótopo de Cobalto-60 (^{60}Co), em que a emissão de radiação gama origina da transição do Níquel-60 (^{60}Ni).
- **Aniquilação:** Quando um pósitron interage com um elétron, ambos desaparecem, resultando na produção de dois fótons que se propagam em direções opostas. Neste processo chamado de **aniquilação**, ocorre a conversão completa da massa das partículas em energia. Cada fóton gerado possui uma energia mínima de 0,511 MeV, correspondente à energia de repouso do elétron ou do pósitron. A radiação gama resultante, conhecida como **radiação de aniquilação**, é frequentemente observada em ambientes onde há núcleos sujeitos a decaimento beta positivo.
- **Reações nucleares:** Após uma reação nuclear, é comum que o núcleo resultante esteja em um estado excitado e, para atingir seu estado fundamental, emita fótons de alta energia. Um exemplo é a reação:



em que o átomo de carbono produzido encontra-se em um estado excitado e, de forma extremamente rápida, decai emitindo um fóton de 4,44 MeV. Fontes dessa natureza são amplamente empregadas em contextos que demandam radiações eletromagnéticas de maior energia do que aquelas oriundas de decaimentos beta.

- **Bremsstrahlung:** Termo alemão para 'frenagem', a radiação Bremsstrahlung é um fenômeno que ocorre quando partículas carregadas, como elétrons, são desaceleradas ao interagir com campos elétricos intensos, seja de núcleos atômicos ou de nuvens de elétrons. O espectro de ondas eletromagnéticas resultante dessa desaceleração é contínuo, com uma energia média significativamente menor que a energia inicial da partícula, mas o valor máximo pode ser igual à própria energia da carga.
- **Raios-X:** Quando os orbitais eletrônicos de um átomo são excitados, o processo de retorno ao estado fundamental pode resultar na emissão de **Raios-X característicos**. As ondas eletromagnéticas geradas nessa transição eletrônica possuem energia bem definida, correspondente à diferença entre a energia de ligação do estado inicial e o estado final do elétron. A energia máxima que pode ser emitida ocorre quando um elétron livre preenche uma vacância na **primeira camada eletrônica (camada K)**, produzindo a linha espectral conhecida como linha $K\alpha$.

2.1.3 Interação com a Matéria

A interação da radiação eletromagnética com a matéria constitui um fundamento essencial para o desenvolvimento de instrumentos de detecção, uma vez que é por meio dessas interações que as informações associadas à radiação podem ser convertidas em sinais detectáveis e interpretáveis.

Quando um feixe colimado de fótons incide sobre um material, as ondas eletromagnéticas interagem com a matéria em eventos que podem resultar na absorção completa dos fótons, encerrando sua trajetória, ou em seu espalhamento (BIRKS, 1964). A fração f do feixe incidente que é absorvida ao atravessar um material de espessura d segue uma relação descrita pela seguinte função exponencial:

$$f = 1 - e^{-\mu d}, \quad (3)$$

em que μ é o coeficiente de atenuação linear, com unidade de $cm^{-1} \cdot \mu$. Cada interação possível possui um coeficiente de atenuação específico, e o coeficiente total pode ser descrito pela soma dos coeficientes individuais:

$$\mu = \sigma + \tau + \chi. \quad (4)$$

Devido a natureza deste trabalho é necessário trazer à atenção apenas três interações, o **espalhamento de compton** (σ), **efeito fotoelétrico** (τ) e a **produção de pares** (χ).

2.1.3.1 Espalhamento Compton

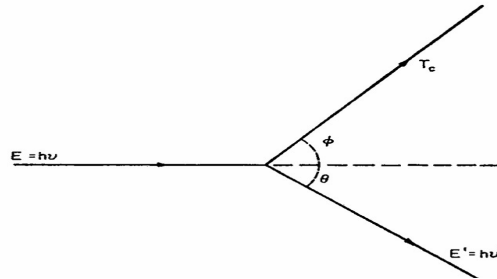
O espalhamento Compton é o fenômeno que descreve a colisão inelástica entre fótons e elétrons livres. No contexto deste trabalho a interação entre ondas eletromagnéticas e elétrons ocorre em um meio sólido, onde os elétrons estão majoritariamente ligados aos átomos com uma determinada energia de ligação. No entanto, devido às altas energias características da radiação gama, que superam significativamente as energias de ligação dos elétrons, é possível parametrizar a interação considerando os elétrons como praticamente em repouso (BIRKS, 1964).

A Fig. 2 ilustra a colisão de um fóton incidente com energia $E = h \cdot f$ e um elétron em repouso. O resultado da colisão é um fóton espalhado a um ângulo θ com energia reduzida $E' = h \cdot f'$ e um elétron com energia cinética adquirida T_c .

Quando se aplica os princípios de conservação de energia cinética e de momento é possível adquirir uma expressão que relaciona a energia resultante do fóton com o ângulo de espalhamento. Segundo KNOLL (2010):

$$hf' = \frac{hf}{1 + \left(\frac{hf}{m_0c^2}\right)(1 - \cos\theta)}, \quad (5)$$

Figura 2: Espalhamento Compton.



Fonte: BIRKS (1964).

em que $m_0c^2 = 0,511$ MeV é a energia de repouso do elétron. A análise da equação (5) revela dois extremos para a energia final do fóton. Quando $\theta \simeq 0$, o fóton praticamente não interage, resultando em $E \simeq E'$ e, por consequência, o elétron não adquire energia. Quando $\theta = \pi$, o fóton ricocheteia transferindo o máximo possível de energia ao elétron. Seguindo a equação (5), a energia do fóton e do elétron pós colisão mais energética é, respectivamente:

$$\text{a) } hf' |_{\theta=\pi} = \frac{hf}{1 + \left(\frac{2hf}{m_0c^2}\right)}; \text{ b) } E_e |_{\theta=\pi} = hf - hf' = hf \frac{2hf/m_0c^2}{1 + 2hf/m_0c^2}. \quad (6)$$

2.1.3.2 Efeito Fótoelétrico

Uma onda eletromagnética só consegue transferir toda a sua energia a um elétron quando este ocupa níveis de energia específicos em um átomo (BIRKS, 1964). O efeito fotoelétrico é um fenômeno em que um fóton interage com um elétron orbital, liberando-o de sua ligação com o átomo. Neste contexto, quando um fóton com energia E maior que a

energia de ligação de um elétron orbital L_e interage com o átomo, um fotoelétron é ejetado com energia cinética E_f , dada por:

$$E_f = E - L_e. \quad (7)$$

2.1.3.2 Produção de Pares

A produção de pares é o processo inverso da aniquilação de partículas. Este fenômeno ocorre quando um fóton com energia E superior a $2m_0c^2 = 1,022 \text{ MeV}$ interage com o campo elétrico intenso próximo a um núcleo atômico. Neste caso, o fóton é convertido em um par de partículas: um pósitron e um elétron. O par é ejetado com energia cinética total equivalente à energia do fóton incidente menos a energia de repouso necessária para criar as partículas. Esta relação, segundo KNOLL(2010), é:

$$E_{e^-} + E_{e^+} = hf - 2m_0c^2. \quad (8)$$

2.2 DETECÇÃO DE RADIAÇÃO

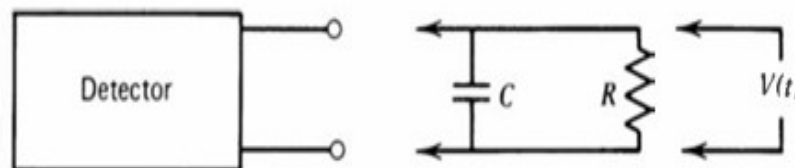
A detecção de radiação é fundamentada na interação da radiação com a matéria, resultando na geração de sinais mensuráveis. Estes sinais são produzidos pela conversão da energia depositada pela radiação em outra forma de energia, como cargas elétricas ou luz, como é o caso dos materiais cintilantes, que podem ser processadas por circuitos eletrônicos e digitais. Em um detector genérico, as etapas fundamentais incluem a interação inicial da radiação com o material, a coleta da carga gerada, a amplificação do sinal da carga e seu processamento para análise.

2.2.1 Modo de Pulso

Para a contagem precisa de eventos e análise espectral detalhada de sinais, cada interação da radiação com o detector deve ser separada no tempo, o que possibilita o exame individual de cada evento, garantindo maior precisão na discriminação de diferentes tipos de radiação pelo espectro de energia. Neste sentido, um detector em modo pulso possibilita que cada resposta do detector seja avaliada como um pulso elétrico cuja amplitude é diretamente proporcional à energia depositada (KNOLL, 2010).

Para garantir que o sinal gerado pelo detector apresente um perfil no formato de pulso, é essencial que o detector esteja conectado a um circuito eletrônico adequado. A Fig. 3 ilustra um circuito simplificado em que R é a resistência equivalente do circuito e C é a capacitância equivalente tanto do circuito quanto do detector. A operação em pulso se baseia na variação de $V(t)$, que representa a carga atravessando R .

Figura 3: Circuito equivalente de entrada de sinal do detector.



Fonte: KNOLL(2010)

Característico de um circuito com resistor e capacitor acoplados, a coleta do sinal dependerá da constante de tempo do circuito, que, de forma simplificada, é dada por $\tau = RC$. Como cada detector possui seu próprio tempo de coleta (t_c), existem dois extremos a considerar na relação entre as duas constantes de tempo (KNOLL, 2010):

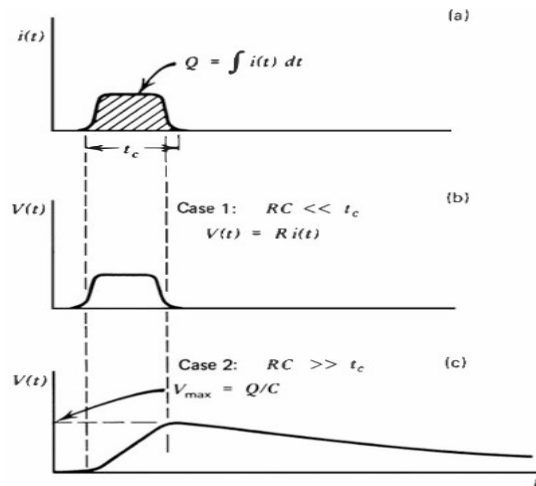
- $\tau \ll t_c$: Neste caso, o circuito reagiria muito mais rápido do que a coleta de carga, e o sinal de tensão no resistor teria a mesma forma do sinal gerado pelo detector, como ilustrado na Fig. 4a. Este tipo de operação é mais utilizado em situações com alta taxa de eventos.

- $t_c \ll \tau$: Neste caso, o circuito coletaria cada pulso do detector de forma separada, o que é ideal para a maioria das aplicações. A Fig. 4c ilustra a relação entre a voltagem e o tempo no circuito. O tempo de subida do sinal depende apenas do tempo de coleta de carga do detector, enquanto a descida da curva varia de acordo com τ . Além disso, a amplitude do sinal está diretamente relacionada à quantidade Q de carga gerada, de acordo com a equação (9). Essa relação é válida somente quando C é mantido constante.

$$V_{max} = Q/C \quad (9)$$

Figura 4: (a) Sinal hipotético de um detector. (b) Sinal de circuito para τ pequeno.

(c) Sinal de circuito para τ grande.



Fonte: KNOLL(2010)

2.2.2 Resolução Energética

A **resolução energética** é uma métrica fundamental na caracterização de detectores de radiação, indicando sua capacidade de distinguir entre eventos que depositam diferentes quantidades de energia.

Quando se realiza um conjunto de N medições independentes de uma variável física x , é possível determinar a média experimental utilizando:

$$\bar{x}_e = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i. \quad (10)$$

Como o decaimento radioativo é um processo estatístico (KNOLL, 2010), as interações da radiação com o detector ocorrem de forma randômica, resultando em flutuações no sinal gerado. Para quantificar essas flutuações, utiliza-se a variância (s^2), que mede o grau de dispersão dos valores de x em relação à média. Para um número finito de medições, a variância é dada por:

$$\bar{s}^2 = \frac{1}{(N-1)} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x}_e)^2. \quad (11)$$

Esses conceitos estatísticos são fundamentais para introduzir o modelo mais relevante na definição da resolução energética: a **distribuição Gaussiana**. Um experimento que registra o número de sucessos x em N tentativas independentes, onde a probabilidade de sucesso p é constante, é descrito inicialmente pela distribuição binomial. No entanto, quando $p \ll 1$ e N é suficientemente grande a ponto que \bar{x}_e seja relativamente maior que 20 ou 30 (KNOLL, 2010), a distribuição binomial pode ser aproximada pela distribuição Gaussiana.

A distribuição Gaussiana é definida pela sua função de distribuição probabilística:

$$P(x) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\bar{x}})} \exp\left(-\frac{(x-\bar{x})^2}{2\bar{x}}\right), \quad (12)$$

em que \bar{x} é a média real de acordo com o modelo. Esta função apresenta algumas propriedades fundamentais:

- A distribuição probabilística é normalizada $\sum_{x=0}^{\infty} P(x) = 1$.

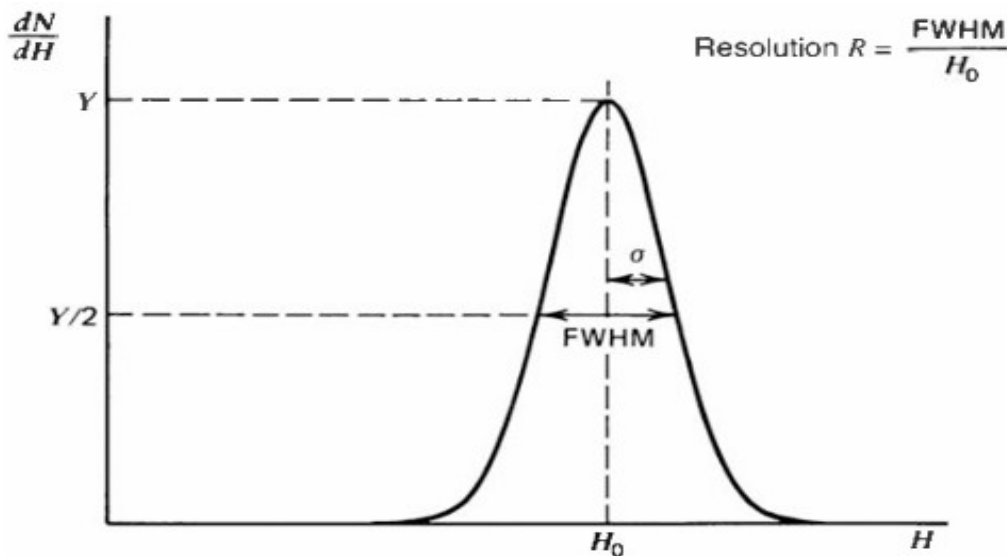
- A distribuição Gaussiana é definida apenas pela média, expressa por $\bar{x} = pN$.
- A variância predita pelo modelo (σ^2) é expressa por $\sigma^2 = \bar{x}$.

Assumindo um detector ideal em que a flutuação dos dados depende apenas da aleatoriedade da geração de carga a partir da interação da radiação com o volume do detector, é possível definir a resolução energética do detector com base nas propriedades da distribuição Gaussiana.

A Fig. 5 define a resolução e ilustra um gráfico da distribuição diferencial da altura do pulso, onde o eixo x representa a altura dos pulsos e o eixo y mostra a taxa de variação das contagens para cada valor de altura. Para análises espectroscópicas da energia depositada, a variável altura é substituída por energia. Dessa forma, a **resolução energética (R)** de um detector é definida pela **largura total na metade do máximo do pico (FWHM)** de contagens dividido pela média dos resultados. A relação entre o desvio padrão da distribuição e o *FWHM* é:

$$FWHM = 2,35\sigma. \quad (13)$$

Figura 5: Definição de resolução energética.



Fonte: KNOLL (2010)

2.2.3 Eficiência do Detector

Como a radiação eletromagnética é desprovida de carga, raios gama, em média, caminham longos trajetos no intervalo entre interações. Por isso, dependendo da magnitude do volume do detector, não é esperado que toda a radiação incidente interaja. Assim, é preciso definir a eficiência de um detector baseado na taxa de absorção da energia comparada com a capacidade da fonte.

Existem duas classes de eficiência de um detector, a **eficiência absoluta** (e_a) e a **eficiência intrínseca** (e_i) (KNOLL,2010):

- **Eficiência absoluta:** É uma grandeza que ignora a geometria do detector e da fonte. Assim, é definida como:

$$e_a = \frac{\text{número de pulsos contados pelo detector}}{\text{numero de fótons emitidos pela fonte}}. \quad (14)$$

- **Eficiência intrínseca:** É uma grandeza que considera a geometria na definição de modo que para uma fonte isotrópica $e_i = e_a \cdot (4\pi/\Omega)$, em que Ω é o ângulo sólido do detector de acordo com a posição da fonte. Assim, é definida como:

$$e_i = \frac{\text{número de pulsos contados pelo detector}}{\text{numero de fótons incidentes no detector}}. \quad (15)$$

A eficiência também pode ser definida a partir da contagem de interações específicas entre o detector e a radiação. Nesse contexto, a **razão pico-total**, representada por r , é uma forma de caracterizar a eficiência de pico. Esta métrica quantifica a fração da energia total depositada no detector que é atribuída a eventos de interação completa. Assim, r é definido pela equação (16) como o número de contagens associadas ao pico de energia total — ou seja, a área sob a curva ilustrada na Fig. 5 — dividido pelo número

total de contagens registradas. Assim, pode-se quantificar uma eficiência não sensível a efeitos como o espalhamento em objetos ao redor ou ruídos espúrios.

$$r = \frac{\text{número de contagens no pico de energia total}}{\text{numero de contagens total}}. \quad (16)$$

2.2.4 Tempo Morto

Derivado da natureza aleatória da contagem de radiação, todo detector em operação deve levar em consideração tanto o intervalo de tempo de resposta do próprio detector quanto o tempo de resposta do sistema eletrônico associado. Em cenários com alta atividade radioativa, a probabilidade de um evento ser ignorado aumenta significativamente caso ocorra rapidamente após um evento anterior. Este fenômeno, em que o detector permanece temporariamente inativo, é denominado **tempo morto**. O tempo de inatividade pode afetar a precisão e a eficiência do sistema de detecção, uma vez que eventos subsequentes não são registrados, impactando diretamente a taxa de contagem e a qualidade dos dados obtidos (KNOLL, 2010).

2.3 CRISTAIS CINTILANTES INORGÂNICOS

Os materiais cintilantes possuem a capacidade de converter a energia cinética de radiações ionizantes em sinais luminosos detectáveis, sendo amplamente utilizados no campo da detecção de radiação devido à sua eficiência e versatilidade. Os cintiladores representam uma das classes mais antigas e estudadas na aplicação de espectroscopia, desempenhando papel central em instrumentação nuclear. A emissão de fótons pode ser classificada em diferentes mecanismos (Knoll, 2010).

A **fluorescência**, principal mecanismo da cintilação, refere-se à emissão rápida de fótons no espectro visível logo após a interação com a radiação, enquanto a **fosforescência** ocorre com tempos de resposta mais longos, emitindo fótons de menor energia. Existe também a chamada **fluorescência atrasada**, na qual a emissão de luz ocorre no mesmo

espectro da fluorescência, mas com um atraso temporal maior devido a processos internos do material.

Materiais cintilantes podem ser encontrados em diversas formas e composições, podendo ser orgânicos ou inorgânicos, e existem nas fases sólida, líquida ou gasosa. Dentre estas opções, os materiais inorgânicos, especialmente os sólidos cristalinos, se destacam em aplicações que exigem alta eficiência na conversão de energia e robustez estrutural. A estrutura ordenada dos cristais facilita a propagação da luz gerada no processo de cintilação, garantindo que o sinal luminoso chegue ao ponto de coleta. Assim, a eficiência de um cintilador depende não apenas de sua capacidade de transformar a energia da radiação incidente em luz, mas também de sua habilidade em transmitir esse sinal luminoso de maneira processável, assegurando sua detecção e análise.

Entre os cintiladores inorgânicos, o **iodeto de sódio (NaI)** é o material mais amplamente utilizado e estudado. Este material destaca-se por suas propriedades ópticas e eficiência na detecção de radiação gama (Knoll, 2010). Além disso, por ser composto de número atômico elevado, apresenta uma alta probabilidade de interação com radiações incidentes.

A dopagem é um processo fundamental que visa melhorar o desempenho de materiais cintilantes, especialmente os cristais inorgânicos. Consiste na introdução de pequenas quantidades de elementos específicos, conhecidos como **ativadores**, na estrutura cristalina do material base. A dopagem cria níveis de energia intermediários que modificam as propriedades ópticas do cristal, permitindo que a energia depositada pela radiação seja eficientemente convertida em luz visível. Sem a dopagem, a eficiência da cintilação seria significativamente reduzida, já que uma fração considerável da energia poderia ser perdida em processos não radiativos, comprometendo a resposta luminosa do material.

Diferentes materiais são utilizados para atender a requisitos específicos de aplicações, variando em densidade, eficiência luminosa, resistência mecânica e ambiental. Abaixo, são apresentados os cristais cintilantes inorgânicos mais utilizados e suas principais características (KNOLL, 2010):

- **NaI:Tl (Iodeto de Sódio dopado com Tálcio):** Um dos cintiladores mais amplamente utilizados devido à sua alta eficiência na detecção de radiação gama, boa transparência óptica e comprimento de onda de emissão bem acoplado a fotomultiplicadores, apesar da grande sensibilidade a umidade. É amplamente empregado em espectroscopia de radiação gama e em sistemas de monitoramento.

- **CsI:Tl (Iodeto de Césio dopado com Tálcio):** Apresenta maior densidade e resistência à umidade quando comparado ao NaI(Tl). É ideal para aplicações onde resistência ambiental e robustez são fatores críticos, como em detectores portáteis e sistemas em ambientes adversos.

- **BGO (Germanato de Bismuto):** Um material puro de alta densidade, o que proporciona a maior probabilidade de interação fotoelétrica dentre todos os materiais cintilantes. É amplamente utilizado em tomografia computadorizada.

- **LYSO (Óxido de Lutécio e Ítrio dopado com Cério):** Uma variação do LSO, onde parte do lutécio é substituído por ítrio, reduzindo custos e melhorando a uniformidade do cristal. Apresenta alta densidade, rápida resposta temporal e resistência mecânica, sendo ideal para tomografia por emissão de pósitrons (PET) e aplicações que exigem alta taxa de contagem.

2.3.1 Estrutura de Cristais

A estrutura dos cristais é caracterizada pela repetição periódica de grupos de átomos, chamados de base, que estão dispostos em pontos específicos no espaço, formando o que é conhecido como rede cristalina. A descrição matemática dessa rede é feita por vetores de translação, que permitem deslocar a base de um ponto para outro, mantendo a mesma disposição atômica. Para que uma rede seja classificada como primitiva, os vetores de translação devem ser escolhidos de modo que qualquer ponto da rede possa ser gerado a partir de qualquer ponto de origem, aplicando-se múltiplos inteiros desses vetores.

O produto misto dos vetores primitivos define o volume da célula primitiva, que é a menor unidade repetitiva da estrutura cristalina (KITTEL, 2005). A partir da escolha adequada dos vetores primitivos, é possível construir uma base de vetores, como $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$, que determina a posição de cada átomo ou conjunto de átomos dentro da célula. A posição de um átomo i em relação à rede cristalina pode ser descrita pela fórmula:

$$r_i = u_1 \vec{a}_1 + u_2 \vec{a}_2 + u_3 \vec{a}_3, \quad (17)$$

em que u_1 , u_2 e u_3 são coordenadas inteiras.

2.3.2 Fenômeno de Cintilação

Um átomo isolado é descrito por uma estrutura eletrônica dividida em diversos níveis de energia, conforme a equação de Schrödinger. No entanto, quando átomos são organizados na estrutura ordenada de um cristal, os níveis de energia dos elétrons interagem de maneira a formar bandas de energia que se estendem por toda a extensão de um cristal perfeito. Essas bandas podem ser classificadas da seguinte forma: **banda de valência**, **banda proibida** e **banda de condução** (incluindo a banda de excitação) (BIRK, 1964).

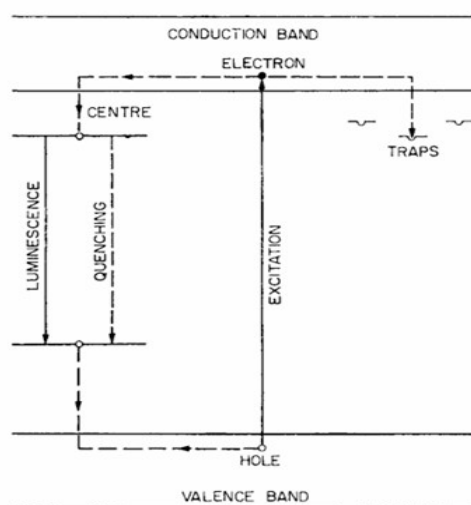
- **Banda de valência:** Os elétrons que ocupam os níveis mais baixos de energia da rede cristalina estão na banda de valência. Esta banda é completamente preenchida com elétrons. Em materiais isolantes, como os de interesse neste trabalho, os elétrons na banda de valência permanecem em equilíbrio, não havendo excitação térmica.
- **Banda proibida:** A banda proibida é uma faixa de energia na qual não há estados disponíveis para os elétrons. Ela estabelece um limite mínimo de energia necessário para que um elétron se mova de uma camada para outra.
- **Banda de condução:** Quando um elétron recebe energias superiores ao gap de energia (E_g), este é promovido a banda de condução, deixando um buraco positivo na camada

de valência. Nesta camada, o elétron está livre para se movimentar pela rede de átomos.

No entanto, um cristal real possui diversas quebras na sua uniformidade estrutural. Estas imperfeições ou impurezas, causam a formação de **centros**, que são regiões onde há níveis discretos de energia a serem ocupados dentro da banda proibida. Estes centros resultam na perda de energia dos elétrons de condução, seja por meio da emissão de fótons (centros de luminescência) ou por dissipação térmica (centros de *quenching*). A Fig. 6 ilustra os mecanismos derivados da estrutura de bandas de um cristal isolante.

Dessa forma, quando uma radiação interage com o cintilador, um par elétron-buraco é formado. Os pares podem se mover de forma independente pelo cristal (ionização) ou se acoplar, formando um exciton (excitação). A fluorescência pode emergir pela captura do elétron-buraco por um centro de luminescência, que pode ser devido a uma impureza ou à própria rede cristalina. A ativação ocorre somente quando tanto o elétron quanto o buraco estão presentes no centro, seja pela captura do exciton ou pela recombinação do par (BIRKS, 1964).

Figura 6: Bandas de energia de um cristal imperfeito.



Fonte: BIRKS (1964)

Duas propriedades que emergem destes mecanismos são de interesse para um cintilador: o **tempo de decaimento** e a **eficiência de cintilação**. O **tempo de decaimento**, relativo ao tempo de coleta t_c citado anteriormente, é o tempo necessário para que a resposta luminosa atinja $1/e$ de seu pico. Para cristais inorgânicos, os valores típicos de tempo de decaimento estão na ordem de dezenas ou centenas de nanosegundos. Como o tempo entre a interação e a ativação dos centros depende do movimento dos elétrons dentro do cristal, que se move em tempos muito menores do que o tempo de decaimento típico, a informação sobre o tempo de decaimento geralmente é suficiente para a aplicação.

A eficiência de cintilação S é definida como a capacidade de transformar a energia radioativa depositada no volume do cintilador em energia convertida em luz. A relação correspondente, segundo KNOLL (2010), é descrita por:

$$S = \frac{\text{Energia convertida em fótons}}{\text{Total de energia absorvida pelo cintilador}} = \frac{\text{fótons}}{\text{MeV}}. \quad (18)$$

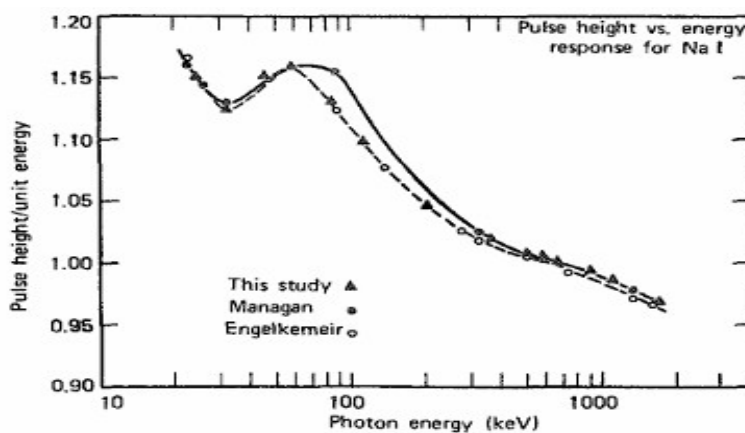
Um cintilador ideal apresentaria a eficiência de cintilação como uma propriedade constante, o que tornaria S diretamente proporcional à energia depositada. Em outras palavras, a resposta do cintilador seria completamente linear. No entanto, na prática, a eficiência de cintilação varia em função da energia incidente. A Fig. 7 ilustra a resposta de um detector de NaI(Tl) quando submetido a fótons de diferentes energias, evidenciando a não linearidade dessa relação. Embora em aplicações rigorosas a calibração seja essencial, a variação relativamente baixa na resposta permite, em muitos casos, assumir uma resposta linear sem introduzir erros significativos.

2.3.3 Formato do Cristal

O formato de um cristal cintilante é de menor importância para o processo de detecção da radiação em geral, já que a espessura do cristal na direção da radiação incidente é o fator que mais influencia sua eficiência intrínseca. Nesse contexto, cristais

cintilantes são normalmente confeccionados em dois formatos principais: cilindro reto e cristal de poço.

Figura 7: Relação entre energia da radiação incidente e a resposta luminosa do NaI(Tl).



Fonte:KNOLL (2010).

2.3.3 Formato do Cristal

O formato de um cristal cintilante é de menor importância para o processo de detecção da radiação em geral, já que a espessura do cristal na direção da radiação incidente é o fator que mais influencia sua eficiência intrínseca. Nesse contexto, cristais cintilantes são normalmente confeccionados em dois formatos principais: cilindro reto e cristal de poço.

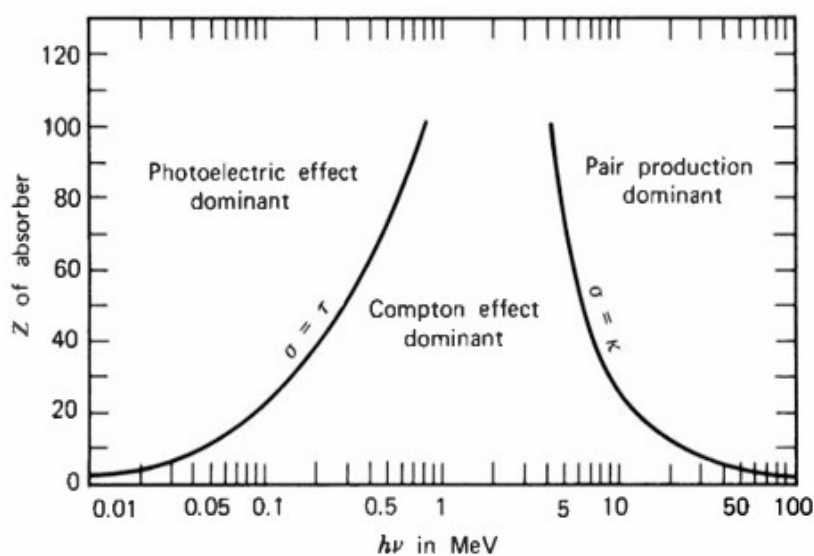
O cilindro reto é amplamente utilizado nesse campo devido à sua praticidade na manufatura e encapsulamento, além de sua face circular ser facilmente acoplável a um tubo fotomultiplicador. Já o formato conhecido como cristal de poço consiste em um cilindro reto com uma cavidade profunda em uma das faces. Esse poço é projetado para maximizar a eficiência do experimento, permitindo que a amostra radioativa seja posicionada no interior do cristal. Dessa forma, dependendo da energia da radiação gama e do raio do cilindro, é possível que a eficiência de um cristal de poço se aproxime de 100% (KNOLL, 2010).

2.3.4 Resposta Esperada e Tamanho

A resposta esperada de um detector depende dos tipos de interações possíveis em certa faixa de energia da fonte, assim como da densidade e do tamanho do cristal, para o caso específico deste trabalho. A energia da fonte interfere na resposta, além da não linearidade discutida anteriormente na seção 2.3.2, pois a probabilidade de cada interação depende da energia da partícula incidente. A Fig. 8 ilustra a relação entre energia da radiação gama e o número atômico do material para cada região predominante de interações. A partir disso, definem-se as **radiações primárias: fotoelétrica, produção de pares e espalhamento Compton**.

Cada uma das radiações primárias interagem de modo a depositar parte da sua energia no detector e gera, como resquício, outro tipo de radiação no processo. Esses novos eventos são categorizados como **radiações secundárias**, sendo de interesse os **elétrons secundário**, oriundos da interação fotoelétrica e espalhamento compton, fótons secundários, como a radiação de frenagem e a emissão de raios-X após uma captura fotoelétrica e o espalhamento em materiais ao redor do detector.

Figura 8: Regiões de dominação de interação de radiação gama.



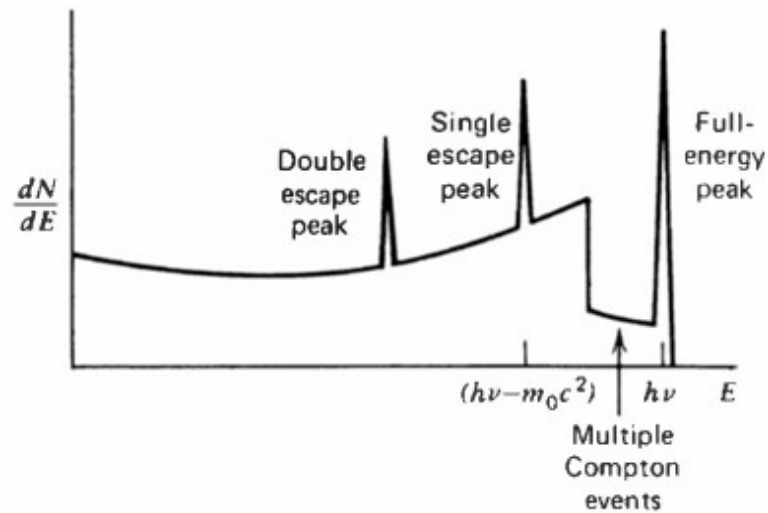
Fonte: KNOLL (2010).

A resposta do detector varia significativamente conforme o tamanho do cristal. No caso de cintiladores cilíndricos de grandes dimensões, superiores a 10 cm (Knoll, 2010), todas as radiações secundárias geradas nas interações são totalmente absorvidas no volume ativo. Essa condição ideal resulta em um pico fotoelétrico estreito e bem definido na energia da fonte, simulando um cenário de absorção completa, como se apenas o efeito fotoelétrico contribuísse para a resposta do detector.

Em contrapartida, detectores pequenos, dimensões de menos de 2 cm (KNOLL, 2010), apresentam um comportamento distinto. As interações são predominantemente de radiações primárias (uma única interação por partícula incidente), resultando num espectro composto por um contínuo de Compton com término abrupto correspondente à energia máxima transferida (6), além do pico fotoelétrico. Quando a energia da fonte ultrapassa muito 1,022 MeV, a produção de pares torna-se relevante, e os dois fótons de aniquilação (0,511 MeV) resultantes tendem a escapar do volume do cristal. Esta perda por escape introduz o pico de duplo escape, com energia igual a $hf - 1,022 \text{ MeV}$.

No entanto, a maioria dos cintiladores utilizados em espectroscopia de raios gama possuem dimensões intermediárias entre os extremos previamente discutidos. A Fig. 9 ilustra a resposta característica de um detector realista, sem materiais ao redor, operando em energias capazes de induzir produção de pares. A probabilidade elevada de múltiplos eventos de espalhamento sequenciais estende suavemente o contínuo de Compton para energias mais altas, enquanto a fuga parcial ou total dos fótons de aniquilação gera picos de escape único e duplo. O pico de energia total, por outro lado, surge quando toda a energia do fóton incidente é depositada no cristal, incluindo a absorção de ambos fótons de aniquilação.

Figura 9: Resposta esperada num cristal de tamanho intermediário.



Fonte: KNOLL (2010).

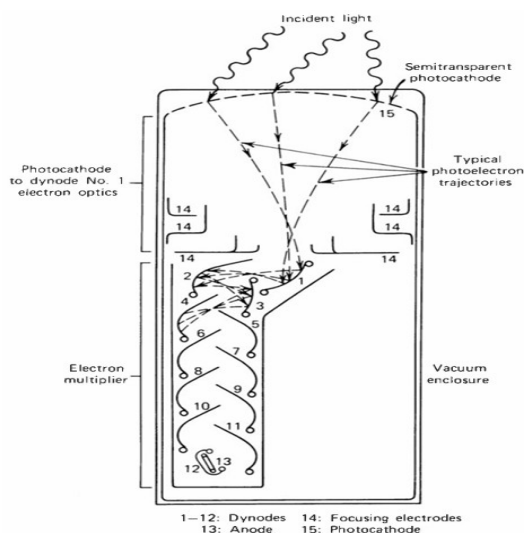
Além disso, é importante considerar alguns outros efeitos das radiações secundárias. O escape de elétrons ou fótons secundários reduz a deposição de energia no volume sensível do detector, gerando subestimação da energia real da partícula incidente, movendo o espectro para menores energias. O espalhamento em materiais ao redor do detector pode gerar radiações secundárias que atingem o detector, causando um pico característico.

2.4 TUBO FOTOMULTIPLICADOR PARA CINTILADORES

O tubo fotomultiplicador é fundamental na contagem cintilante, convertendo pulsos de luz extremamente fracos, alguns milhares de fótons, em sinais elétricos utilizáveis, com cargas geradas de $10^7 - 10^{10}$ elétrons. Ele é formado por um envelope de vidro que mantém um vácuo interno, um fotocátodo sensível à luz e uma estrutura multiplicadora de elétrons. O fotocátodo converte os fótons incidentes em elétrons de baixa energia, preservando a duração temporal do pulso luminoso. Os elétrons iniciais, em pequena quantidade, são acelerados por campos elétricos intensos, colidindo com dínodos, onde são multiplicados em várias ordens de grandeza. Este processo gera pulsos de carga significativos, que são coletados no ânodo (Fig. 10). O sinal resultante é então processado eletronicamente e digitalmente para contagem ou análise espectral, mantendo a linearidade com a intensidade do pulso de luz original (KNOLL, 2010).

A sensibilidade espectral do fotocátodo é determinante para a escolha do tubo e deve ser compatível com o espectro de emissão do cintilador, que pode variar do ultravioleta ao infravermelho, garantindo máxima eficiência na detecção dos pulsos de luz gerados.

Figura 10: Diagrama de funcionamento básico de tubo fotomultiplicador.



Fonte: KNOLL (2010).

2.5 MÉTODO DE MONTE CARLO N-PARTÍCULAS

O Método de Monte Carlo é um artifício matemático que simula a história de um número de partículas de modo que se possa ter uma estimativa precisa de um sistema macroscópico. Enquanto um método analítico busca uma solução exata para um problema simplificado e aproximado, o Método de Monte Carlo busca uma solução aproximada para um problema exato (BREWER, 2009). Esta técnica baseia-se na geração de números aleatórios para simular eventos e interações entre partículas radioativas e materiais especificados. Cada partícula é acompanhada ao longo de sua trajetória, desde sua origem até seu destino final. As interações que ocorrem ao longo do caminho são determinadas por dados probabilísticos. A soma dos resultados dessas trajetórias individuais fornece uma estimativa estatística do comportamento médio do sistema.

O MCNP (Monte Carlo N-Partículas) é um código de transporte de partículas de propósito geral, contínuo em energia e com geometria generalizada, projetado para resolver uma ampla gama de problemas (BREWER, 2009). Desenvolvido em 1977 para unificar diversos códigos Monte Carlo específicos, o MCNP permite aos usuários definir detalhes como a geometria do problema, os materiais envolvidos, as características das fontes de partículas e os resultados desejados, conhecidos como "*tallies*". Sua precisão e confiabilidade são amplamente reconhecidas, suportadas por uma base de dados nucleares e atômicos de alta qualidade, extensos testes de verificação e validação, e uma sólida comunidade global que utiliza o código em diversas aplicações científicas e industriais.

Os *tallies* especificam o tipo e a localização da informação desejada, como estimativas de fluxo, deposição de energia, espectros de partículas ou reações específicas. Todas as informações adquiridas são normalizadas de forma que, para obter resultados comparáveis a uma realidade experimental, deve-se multiplicar-los pela atividade da fonte.

3 MATERIAIS E METODOLOGIA

3.1 IODETO DE SÓDIO DOPADO COM TÁLIO (NaI:Tl)

O iodeto de sódio dopado com tálio (NaI(Tl)) é o material cintilador inorgânico mais amplamente utilizado na detecção e espectroscopia de radiação gama. Em 1948, Robert Hofstadter foi o primeiro cientista a testar formalmente o NaI(Tl) como cintilador, descrevendo-o como "pequenos cristais extremamente luminescentes" (HOFSTADTER, 1948). A partir dessa descoberta, o NaI(Tl) revolucionou a área de espectroscopia de radiação gama, proporcionando um avanço significativo no desempenho dos detectores, superando os materiais em destaque da época, principalmente os cintiladores orgânicos, como o naftaleno.

Embora existam cintiladores com maior eficiência de cintilação, como o CsI(Tl) e o SrI₂(Eu), ou com tempo de decaimento mais curto, como os inorgânicos rápidos ativados com cério (como GSO, YAP e LSO), ou ainda materiais que combinam essas características, como os haletos de lantânio dopados com cério, como LaCl₃(Ce) e LaBr₃(Ce), o NaI(Tl) continua hegemonizando este campo. Isto se deve à junção da sua altíssima eficiência de cintilação, ao seu relativamente baixo tempo de decaimento, à grande disponibilidade de seus componentes e ao seu baixo custo de produção (KNOLL, 2010).

Esta seção abordará, de forma mais detalhada, a estrutura e as propriedades específicas que tornam o NaI(Tl) tão importante na detecção de radiação gama, assim como o seu método de manufatura.

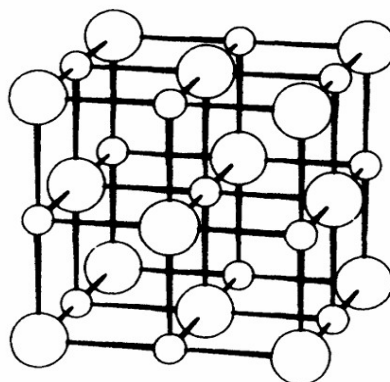
3.1.1 Estrutura do NaI(Tl)

A dopagem de tálio (Tl) no iodeto de sódio (NaI) adiciona uma quantidade muito pequena de átomos ao sistema já altamente ordenado, fazendo com que a estrutura cristalina do NaI(Tl) dopado seja praticamente idêntica a do iodeto de sódio puro. O iodeto de sódio é um composto inorgânico formado por átomos de sódio (Na, Z=11) e iodo (I,

Z=53), cujos elementos se combinam por meio de uma ligação iônica. Neste tipo de ligação, o sódio, um metal, perde um elétron, que é transferido para o iodo, um elemento não metálico, resultando na formação de um composto iônico.

A estrutura cristalina resultante é semelhante a do cloreto de sódio (NaCl), tendo um formato de **rede cúbica de face centrada** (LADD, 1999). Esta estrutura é caracterizada pelo posicionamento dos átomos nas faces e nos vértices de um cubo. A rede de átomos do cristal é definida pelos vetores primitivos $\vec{a}_1 = \vec{a}_2 = \vec{a}_3 = 3.24 \text{ \AA}$ (CRYSTALLS, 2025), que configuram a distância entre os átomos de iodo localizados nos vértices da célula unitária. A Fig. 11 ilustra a organização cristalina característica do NaI, onde os círculos maiores representam os átomos de iodo e os círculos menores representam os átomos de sódio.

Figura 11: Estrutura cúbica de face centrada para NaI.



Fonte: LADD (1999).

A adição de tálio ao cristal ocorre como uma impureza substitucional, substituindo os íons Na^+ por Tl^+ na estrutura cristalina (FILIPPONI, 2020). De acordo com BLACKLOCKS (2007), esta substituição preserva a estrutura cúbica de face centrada característica do iodeto de sódio puro. No entanto, a diferença nos raios iônicos entre o sódio (1,16 Å) e o tálio (1,64 Å) provoca uma leve expansão na rede cristalina, contribuindo para a emergência das propriedades de um centro luminoso.

3.1.2 Propriedades do NaI(Tl)

A Fig. 12 apresenta uma coletânea de cintiladores inorgânicos e suas respectivas propriedades ópticas. A seguir, serão discutidas em formato de lista as principais características do iodeto de sódio dopado com tálio, com uma breve comparação com outros cintiladores.

Figura 12: Tabela com propriedades de cintiladores inorgânicos.

	Specific Gravity	Wavelength of Max. Emission	Refractive Index	Decay Time (μ s)	Abs. Light Yield in Photons/MeV	Relative Pulse Height Using Bialk. PM tube
Alkali Halides						
NaI(Tl)	3.67	415	1.85	0.23	38,000	1.00
CsI(Tl)	4.51	540	1.80	0.68 (64%), 3.34 (36%)	65,000	0.49
CsI(Na)	4.51	420	1.84	0.46, 4.18	39,000	1.10
LiI(Eu)	4.08	470	1.96	1.4	11,000	0.23
Other Slow Inorganics						
BGO	7.13	480	2.15	0.30	8200	0.13
CdWO ₄	7.90	470	2.3	1.1 (40%), 14.5 (60%)	15,000	0.4
CaWO ₄	6.1	420	1.94	8	15,000	
SrI ₂ (Eu)	4.6	435		1.2	85,000	
ZnS(Ag) (polycrystalline)	4.09	450	2.36	0.2		1.3 ^d
CaF ₂ (Eu)	3.19	435	1.47	0.9	24,000	0.5
Unactivated Fast Inorganics						
BaF ₂ (fast component)	4.89	220		0.0006	1400	na
BaF ₂ (slow component)	4.89	310	1.56	0.63	9500	0.2
CsI (fast component)	4.51	305		0.002 (35%), 0.02 (65%)	2000	0.05
CsI (slow component)	4.51	450	1.80	multiple, up to several μ s	varies	varies
CeF ₃	6.16	310, 340	1.68	0.005, 0.027	4400	0.04 to 0.05
Cerium-Activated Fast Inorganics						
GSO	6.71	440	1.85	0.056 (90%), 0.4 (10%)	9000	0.2
YAP	5.37	370	1.95	0.027	18,000	0.45
YAG	4.56	550	1.82	0.088 (72%), 0.302 (28%)	17,000	0.5
LSO	7.4	420	1.82	0.047	25,000	0.75
YSO	4.54	420		0.070	24,000	
LuAP	8.4	365	1.94	0.017	17,000	0.3
LaCl ₃ (Ce)	3.79	350		0.028	46,000	
LaBr ₃ (Ce)	5.29	380	2.05–2.10	0.026	63,000	
Glass Scintillators						
Ce activated Li glass ^b	2.64	400	1.59	0.05 to 0.1	3500	0.09
Tb activated glass ^b	3.03	550	1.5	~3000 to 5000	~50,000	na
For comparison, a typical organic (plastic) scintillator:						
NE102A	1.03	423	1.58	0.002	10,000	0.25

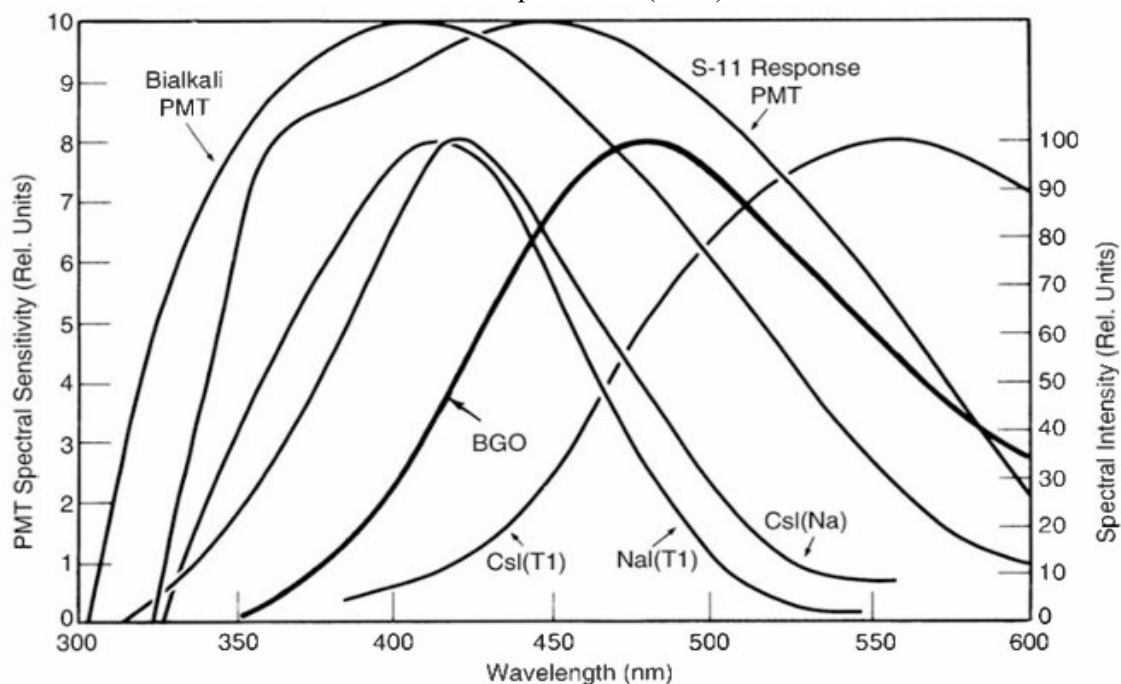
Fonte: KNOLL (2010).

- **Eficiência de Cintilação (Light Yield):** Conforme discutido anteriormente, o NaI(Tl) destaca-se como um dos cintiladores com maior capacidade de gerar fótons por unidade de energia depositada em seu volume. De acordo com a Fig. 10, o NaI(Tl) é capaz de produzir, em média, 38.000 fótons/MeV. Dentre os cintiladores tradicionais, apenas variantes do iodeto de cério, como o CsI(Tl), apresentam rendimentos de luz

superiores. Contudo, descobertas das últimas duas décadas, como o iodeto de estrôncio dopado com európio ($\text{SrI}_2(\text{Eu})$) e os haletos de lantânio dopados com cério ($\text{LaBr}_3(\text{Ce})$ e $\text{LaCl}_3(\text{Ce})$), estão abrindo uma nova fronteira para a evolução dos cintiladores. Esses novos materiais oferecem rendimentos de luz ainda maiores, melhor resolução energética e maior linearidade, tornando-se alternativas promissoras para aplicações de alta precisão na detecção de radiação (KNOLL, 2010).

- **Índice de Refração:** O índice de refração do cristal cintilante desempenha um papel crucial na propagação da luz gerada em seu interior, influenciando se ela escapará do detector ou ficará aprisionada por reflexões internas sucessivas. Para maximizar a eficiência de coleta de luz, é desejável que o índice de refração do cristal seja o mais próximo possível do vidro ($n=1,5$), utilizado na montagem dos tubos fotomultiplicadores. Índices maiores aumentam a probabilidade de perdas ópticas devido ao aprisionamento da luz. No caso do iodeto de sódio dopado com tálio, que possui índice acima do ideal ($n=1,85$), ainda há a possibilidade de um acoplamento eficaz com o tubo. Para minimizar perdas e otimizar a coleta de luz, superfícies do cristal que não estão diretamente alinhadas com o fotocátodo são frequentemente texturizadas ou revestidas com refletores difusos (BIRKS, 1964).
- **Espectro de emissão:** O espectro de emissão de um cristal cintilante corresponde ao intervalo de comprimentos de onda em que a luz é emitida após a interação com a radiação. No caso do iodeto de sódio dopado com tálio (NaI:Tl), o espectro de emissão é determinado pelos centros de luminescência do tálio, resultando em um pico característico em torno de 415 nm, na região do azul-violeta. A utilidade de um cintilador está diretamente relacionada ao seu espectro de emissão, pois cada tipo de fotocátodo possui um espectro específico de absorção de fótons. Dessa forma, o NaI(Tl) se destaca por emitir luz em um espectro que é favorável a diversos tubos fotomultiplicadores comerciais (KNOLL, 2010). A Figura 14 ilustra a relação entre a emissão de alguns cintiladores inorgânicos e a absorção de fotocátodos comuns.

Figura 13: Espectro de emissão de alguns cristais inorgânicos em comparação com alguns tubos fotomultiplicadores (PMT) comerciais.



Fonte: KNOLL (2010).

- **Higroscopia:** Quando em contato com a humidade do ar, um filme amarelo se forma na superfície do cristal de NaI(Tl). Poucas horas de exposição são o suficiente para a degradação da magnitude dos pulsos luminosos (Hofstadter, 1948).
- **Auto absorção:** O problema de auto absorção é particularmente comum em cristais puros, nos quais a energia necessária para excitar os centros luminosos é semelhante à energia da luz emitida por esses mesmos centros, resultando na degeneração do sinal luminoso. Com a dopagem, os centros luminosos de NaI(Tl) emitem luz em uma frequência menor do que a necessária para excitar a rede cristalina, evitando, assim, a reabsorção e melhorando a eficiência do detector (KNOLL, 2010).
- **Tempo de decaimento (t_d):** O pulso principal de cristais de NaI(Tl) é marcado por uma subida de aproximadamente 60 ns, que não depende da concentração de tálio. No entanto, a descida depende da concentração de forma que em concentrações ótimas de tálio o t_d é aproximadamente 230 ns, enquanto para concentrações menores o t_d pode chegar em 350 ns. De acordo com BIRKS (1964), isso ocorre provavelmente pela

maior concentração de centros de quenching quando os centros de Tl^+ se encontram mais pertos entre si, o que facilita o transporte para centros luminosos e, conseqüentemente, acelera o tempo de decaimento. O tempo de decaimento do NaI(Tl) é relativamente alto quando comparado com muitos outros cintiladores como os cristais orgânicos e outras alternativas inorgânicas, o tornando pouco prático para aplicações com altas taxas de contagens.

- **Relação com temperatura:** Foi observado que o tempo de decaimento e a eficiência de cintilação dependem da temperatura do cristal. O tempo de decaimento reduz com o aumento da temperatura (BIRKS, 1964), melhorando o desempenho do detector. No entanto, a eficiência piora em temperaturas mais altas que a ambiente (KNOLL, 2010).
- **Resolução energética:** A resolução de um cristal cintilante inorgânico depende da distribuição uniforme, eficiência dos centros luminosos e da não linearidade da deposição de energia por meio de várias partículas diferentes com energias variadas. A transformação de fótons em cargas também interferem na resolução (BIRKS, 1964). Dessa forma, a resolução de cristais de NaI(Tl) variam entre valores ótimos de menos de 7% a valores aceitáveis de cerca de 10%. Cristais maiores tendem a ter pior resolução devido a piora na coleção uniforme de luz.

3.1.3 Crescimento e Montagem de NaI(Tl)

O crescimento de cristais de NaI(Tl) é um processo crítico para a fabricação de detectores cintiladores, já que a pureza e a homogeneidade do ativador são essenciais para garantir uma boa resolução e eficiência. O principal método comercial é o de Bridgman-Stockbarger vertical, que envolve a técnica de crescimento por fusão em um cadinho selado, por causa da higroscopia do material, na qual matérias-primas purificadas de NaI e traços de Tl são aquecidos. O material é aquecido acima da temperatura de fusão até formar um líquido homogêneo e, então, resfriado com um pequeno gradiente de temperatura. Para evitar o crescimento de mais de um cristal é importante que o cadinho tenha base cônica (LIMA, 1990).

Alternativas comuns como o método de Kyropoulos (BIRKS, 1964) e o método de Czochralski (LIMA, 1990) falham em obter os mesmos padrões de pureza e homogeneidade que o método de Bridgman. Mas métodos focados na obtenção de amostras policristalinas de NaI(Tl) (pelo método skull (TARANYUK, 2011), tem demonstrado uma forma mais economicamente viável de atingir os mesmos resultados que o cristal único.

Após o crescimento, o cristal de NaI(Tl) é cortado e polido, para otimizar a transmissão de luz, em uma câmara seca com umidade controlada. Então, é colado no cristal um vidro para o acoplamento óptico com o tubo fotomultiplicador, a cola precisa ter índice de refração próximo do cristal. Devido à higroscopicidade do NaI, a montagem do detector exige encapsulamento hermético com material leve, geralmente em invólucros de alumínio, e revestidos internamente com uma camada refletiva para maximizar a coleta de fótons gerados pela cintilação. São usados refletores difusos como pó de óxido alumínio (Al_2O_3) e de óxido de magnésio (MgO), que possuem efeitos similares de reflexão (EISSA, 2010).

3.2 SIMULAÇÃO MCNP DE IODETO DE SÓDIO DOPADO COM TÁLIO

Como o MCNP simula o contato entre radiação e materiais a partir da probabilidade de cada tipo de interação, o código a princípio não simula as complexidades das relações entre campos eletromagnéticos. Há softwares baseados no método de Monte Carlo que suprem a necessidades de modelos atômicos mais completos como EGS4 , GEANT (GHAL-EH, 2010) e FLUKA (DEMIR, 2021). Assim, a presente simulação será direcionada à análise dos processos decorrentes das interações da radiação com o cristal de NaI(Tl). Cabe ressaltar que, devido às limitações da ferramenta utilizada, não será possível investigar a geração de fluorescência nos centros luminosos de tálio. Consequentemente, a análise assume que o sinal gerado pelo detector corresponde idealmente à energia depositada no cintilador.

3.2.1 Objetivos

- Cálculo da razão pico-total da energia depositada em dois tamanhos diferentes de cristal de NaI(Tl). Um cristal relativamente pequeno (SALGADO, 2021) e um cristal intermediário (HOANG DUC TAM, 2017), de acordo com os intervalos de tamanho definidos.
- Estimar a resolução energética em dois tamanhos diferentes de cristal de NaI(Tl).

3.2.2 Descrição da Simulação

A simulação baseia-se em um modelo já testado e validado de geometria de um detector de NaI(Tl), desenvolvido de acordo com o padrão industrial japonês (SAITO, 1981). O modelo é composto por um cilindro de iodeto de sódio dopado com tálio, revestido por um refletor de pó de óxido de magnésio (MgO) em uma cápsula de alumínio. Além disso, o tubo fotomultiplicador foi substituído por um sólido de alumínio. As frações atômicas foram obtidas do *Compêndio de Dados de Composição de Materiais para Modelagem de Transporte de Radiação* (DETWILER, 2021), no qual a concentração de

tálio no cristal é de 0,2 wt%, uma concentração ótima para maximizar a luminosidade e evitar efeitos de quenching (TREFILOVA, 2002). A seguir, uma descrição detalhada de cada simulação:

- **Cristal relativamente pequeno:** O modelo é composto por um cilindro de NaI(Tl) com 3,1 cm de diâmetro, 2 cm de espessura e densidade de 3,667 g/cm³. O refletor de MgO é um pó de 3 mm de espessura e densidade de 2 g/cm³. Há também uma cápsula cilíndrica de alumínio com 1 mm de espessura na face e 2 mm na lateral, além de um cilindro de alumínio colado na face do cristal (substituindo o tubo fotomultiplicador), com 4,1 cm de diâmetro e 3 cm de altura. A densidade dos dois sólidos de alumínio é 2,6989 g/cm³.
- **Cristal intermediário:** O modelo é composto por um cilindro reto de NaI(Tl) com 7,6 cm de diâmetro, 7,6 cm de espessura e densidade de 3,667 g/cm³. O refletor de MgO é um pó de 3 mm de espessura e densidade de 2 g/cm³. A cápsula de alumínio tem 1 mm de espessura na face e 2 mm na lateral, e o cilindro de alumínio colado na face do cristal (tubo fotomultiplicador) tem 4,1 cm de diâmetro e 3 cm de altura. A densidade dos dois sólidos de alumínio também é 2,6989 g/cm³.

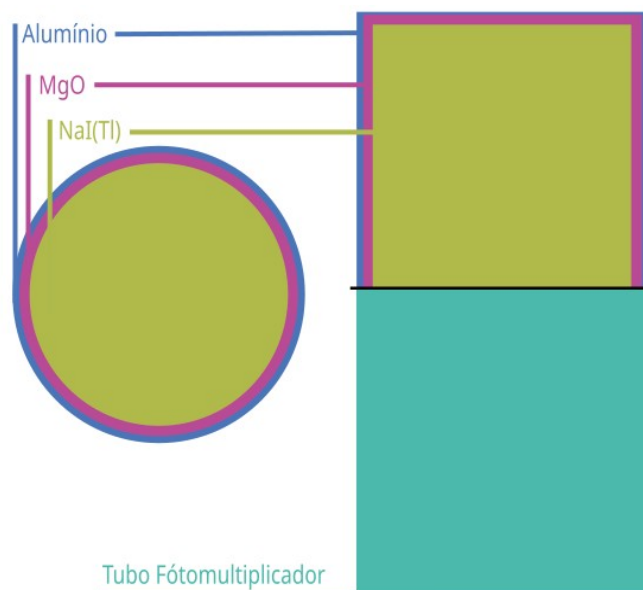
A Fig. 14 ilustra a geometria do cenário. Em ambos os experimentos, a fonte de radiação está localizada a 10 cm da face do cilindro e representa o isótopo radioativo Cobalto-60, que emite fótons a 1,17 e 1,33 MeV, padrão utilizado pela indústria para testes de resolução (BIRKS, 1964).

3.2.3 Considerações sobre a Simulação de Detectores

Para a simulação de uma resposta próxima da realidade utilizando MCNP, é preciso que se utilize uma função específica do código chamada GEB (Gaussian Energy Broadening). Esta função aplica uma função Gaussiana na simulação das interações entre a radiação e o objeto de análise a partir de parâmetros a , b e c de acordo com a seguinte função:

$$FWHM = a + b\sqrt{E + cE^2}, \quad (19)$$

Figura 14: Diagrama da geometria da simulação.



Fonte: Autoria própria

em que E é a energia da partícula incidente. Nesse sentido, para simular a resposta esperada de um detector é preciso, primeiro, construir uma curva da relação entre sua resolução e a energia da radiação detectada. Por isso, a simulação do cristal pequeno foi baseada em um modelo já validado usado por SALGADO (2012). O mesmo foi feito para o cristal intermediário (HOANG DUC TAM, 2017).

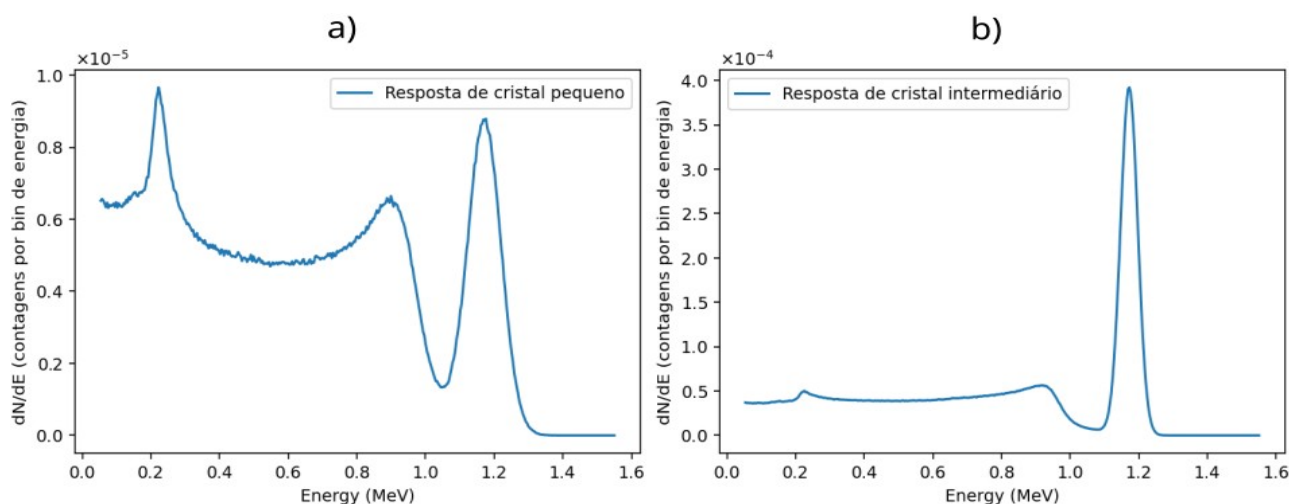
Para o cálculo da resolução e eficiência pela razão pico-total de um detector, é necessário a utilização de um tally específico. O Tally 8 é configurado para estimar a deposição de energia da partícula da fonte e das radiações secundárias criadas. Para isso, foi necessário a definição precisa do tratamento físico de ambos fótons e elétrons por meio do card *PHYS*. O tally foi construído no input para que a energia seja depositada em 400 intervalos de energia entre 0,05 e 1,6 MeV.

A resolução e a razão pico-total será estimada a partir da simulação de ambos cristais com uma fonte de uma única energia e do ajuste gaussiano do pico fótoelétrico. Dessa forma, com o ajuste pode-se descobrir o desvio padrão da curva, que é essencial para o cálculo final.

4 RESULTADOS

Primeiro, foram feitas as simulações de ambos cristais com uma fonte de emissão isotrópica de fótons monoenergéticos de 1,17 MeV. A Fig 14 ilustra a distribuição diferencial de pulso-energia de cada casos. Os erros relativos do tally foram de acordo com o padrão de uma simulação confiável (KULESZA, 2022).

Figura 15: Resposta do cristal de NaI(Tl) para: a) cristal pequeno e b) cristal intermediário.

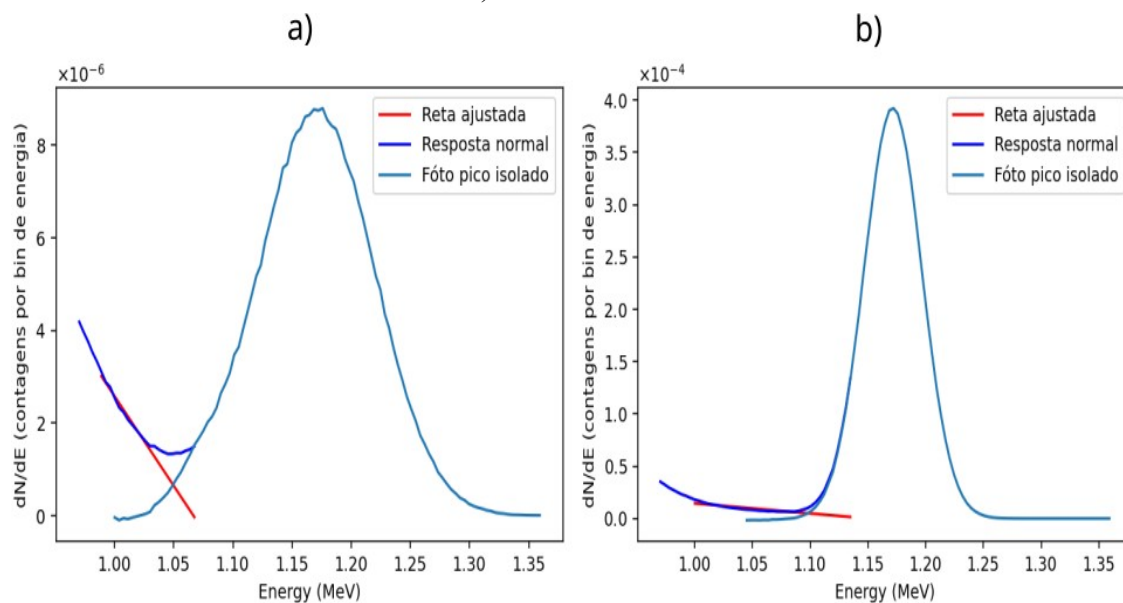


Fonte: Autoria Própria.

Cada um dos picos fotoelétricos foram isolados e ajustados a uma distribuição gaussiana, com confiabilidade do ajuste (R^2), acima de 99%.

A partir disso, foi possível obter os desvios padrão e a localização das amplitudes de cada gaussiana. Com isso, a resolução foi estimada a partir da equação (13) e da definição de resolução na Fig. 6. Já para a razão entre fóto pico e total foi estimada pela soma de toda a contribuição do fótopico e a soma de todos os pulsos registrados pelo tally. Como é notável na Fig. 14a, o espectro do contínuo de compton se entrelaça com o início da gaussiana do cristal pequeno, por isso foi necessário isolar o fótopico. Assim, um ajuste foi feito supondo que a queda do contínuo ocorre de forma linear. As Fig. 15 ilustra a resposta normal do detector em contraponto com o fóto pico isolado para os dois casos.

Figura 16: Isolamento da gaussiana do fóto pico: a) cristal pequeno,
b) cristal intermediário.



Fonte: Autoria Própria.

Deste modo, foi construído a Tab. 1, com as estimativas organizadas para cada simulação e seus respectivos erros propagados (**APENDICE - A**).

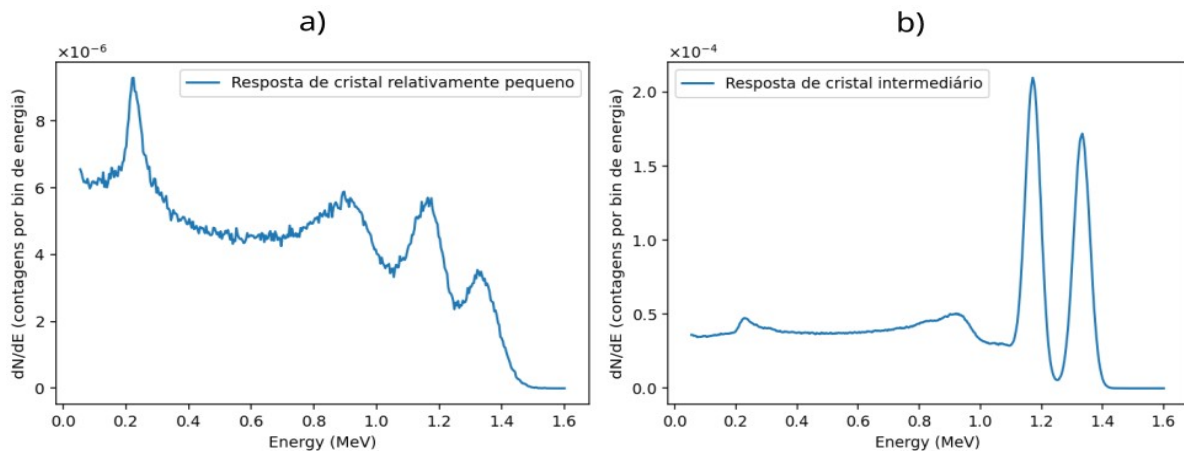
Tabela 1: Dados estimados por simulação em MCNP.

Casos	pico/total (%)	erro	resolução (%)	erro	Local de pico	erro
cristal pequeno	16,7326	5E-03	10,333	1E-03	1,1693	5E-04
Cristal intermediário	37,5845	4E-03	5,0491	2E-04	1,1716	9E-05

Fonte: Autoria Própria.

Por fim, foram feitas as simulações em ambos os casos em que os dois picos do Cobalto-60 estão sendo emitidos pela fonte, 1,17 e 1,33 MeV, para que se faça uma análise da diferenciação dos picos de acordo com a resolução obtida (Fig. 16).

Figura 17: Resposta de duplo pico com NaI(Tl) para: a) cristal pequeno e b) cristal intermediário.



Fonte: Autoria Própria.

5 DISCUSSÃO DE RESULTADOS

No estudo da resposta do cristal pequeno, é notável que em uma fonte de 1,17 MeV a produção de pares no interior do cristal não foi relevante o suficiente para a produção de um pico de duplo escape. Assim, as características principais do espectro (Fig. 14a) incluem o contínuo de Compton, o fóto pico e um pico pronunciado próximo a 0,2 MeV. O contínuo de Compton domina grande parte das contagens, indicando que as dimensões reduzidas do cristal não favorecem interações fotoelétricas. Além disso, é notável que o espectro de compton tem uma queda levemente suavizada próxima de 0,9 MeV, revelando a pequena expressão de múltiplos espalhamentos. A região da queda do contínuo está de acordo com as previsões teóricas da energia máxima transferida a um elétron pela equação (6b):

$$E_{e^-}|_{\theta=\pi} = hf - hf' = hf \frac{2hf/m_0c^2}{1 + 2hf/m_0c^2} = \frac{hf}{1 + \frac{m_0c^2}{2hf}} = \frac{1,17}{1 + \frac{0,511}{2 \cdot 1,17}} \simeq 0,96 \text{ MeV}$$

O fóto pico da resposta do cristal pequeno, apresentou resolução de 10,33% (Tab. 1), com fator de concordância (razão entre o valor obtido e o valor do artigo) de 99% quando comparado ao experimento de SALGADO (2021). A pequena diferença de 1% pode ser atribuída a variações na distância entre a fonte e o detector entre as duas simulações. Embora essa resolução não seja ideal para aplicações de alta precisão, é adequada para usos práticos. Fatores como a geometria do cristal (altura igual ao diâmetro) e possíveis imperfeições na fabricação podem influenciar a homogeneidade da deposição de energia, mas esses detalhes não foram explorados no artigo de referência. A eficiência do fóto pico, de aproximadamente 16,7%, representa a fração de eventos com deposição total de energia no cristal. Essa métrica não foi discutida por Salgado (2021), o que limita comparações adicionais.

Destaca-se ainda o pico de retroespalhamento próximo de 0,2 MeV, resultante de fótons espalhados em ângulos superiores a 110° nos materiais circundantes, como suportes

de alumínio ou o tubo fotomultiplicador. Conforme Knoll (2010) gamas espalhados nestes ângulos possuem energia próxima a 0,25 MeV, o que explica a posição consistente do pico.

Para o cristal intermediário, o pico de retroespalhamento mantém-se na mesma região energética, porém menos acentuado. Isso ocorre devido à maior espessura do cristal (7,6 mm), que reduz a probabilidade de fótons escaparem e interagirem com o tubo fotomultiplicador. O contínuo de Compton também exhibe um alongamento mais pronunciado, indicando maior presença de espalhamentos múltiplos em comparação ao cristal pequeno. O fóto pico, por sua vez, apresenta resolução de 5%, com concordância de 101,4% em relação aos dados experimentais de Hoang Duc Tam (2017). A diferença de 1,4% pode ser explicada por variações na geometria do experimento e na distância fonte-detector entre os dois trabalhos. A melhoria na resolução está associada ao volume intermediário do cristal e à qualidade superior do material (padrão comercial da Amptek, Inc.). A razão entre as contagens do fóto pico e o total de eventos subiu para 37,6%, refletindo maior eficiência devido ao aumento do ângulo sólido.

Na análise da resposta à fonte de Cobalto-60 (Fig. 16), que emite fótons de 1,17 MeV e 1,33 MeV, o cristal intermediário demonstra capacidade superior em resolver os dois fóto picos. Já no cristal pequeno, ocorre sobreposição entre os picos, podendo exigir técnicas digitais para sua identificação em situações não ideais como a deste trabalho. Apesar disso, ambos os detectores permitem a distinção dos picos, mas há evidência do impacto do tamanho e da qualidade do cristal na resolução espectral.

6 CONCLUSÃO

O estudo realizado permitiu analisar o desempenho de cristais de NaI(Tl) de diferentes dimensões na detecção de radiação gama, com ênfase em parâmetros como resolução energética, razão pico-total e análise espectral. Por meio de simulações computacionais com MCNP, foi possível validar modelos teóricos e comparar os resultados com dados experimentais publicados.

Para o cristal relativamente pequeno (3,1 cm de diâmetro \times 2 cm de espessura), observou-se uma resolução energética de 10,33% para o fóto pico de 1,17 MeV, com razão pico-total de 16,7%. Esses valores refletem limitações intrínsecas ao volume reduzido, que favorece interações únicas e dificulta a absorção total de energia. A presença de um contínuo de Compton dominante e um pico de retroespalhamento em 0,25 MeV evidenciou a influência de materiais circundantes.

Já o cristal intermediário (7,6 cm de diâmetro \times 7,6 cm de espessura) apresentou desempenho superior, com resolução de 5,05% e eficiência de 37,6%. O maior volume aumentou a probabilidade de interações completas e estendeu a contribuição de espalhamentos múltiplos, resultando em um fóto pico mais definido. A capacidade de distinguir claramente os dois picos do Cobalto-60 demonstrou a importância do tamanho e qualidade do cristal em aplicações que exigem alta precisão.

6.1 TRABALHOS FUTUROS

Este trabalho consolidou conhecimentos fundamentais em instrumentação nuclear, com ênfase no iodeto de sódio dopado com tálio (NaI:Tl), estabelecendo uma base sólida para futuras pesquisas. O aprofundamento na detecção de radiação utilizando NaI(Tl) requer a aplicação prática do conhecimento adquirido em técnicas experimentais. Para o desenvolvimento de um protótipo de detector com NaI(Tl), será necessário o aprofundamento em tópicos como tubos fotomultiplicadores, eletrônica nuclear e técnicas digitais de espectroscopia, assim como em física nuclear experimental em geral.

REFERÊNCIAS

NASA. *Spectra and What They Can Tell Us*. Disponível em: <https://imagine.gsfc.nasa.gov/science/toolbox/spectral1.html>. Acesso em: 5 dez. 2024.

KNOLL, Glenn F. *Radiation Detection and Measurement*. 4. ed. Hoboken: John Wiley & Sons, 2010.

GRIFFITHS, David J. *Eletromagnetismo*. 4. ed. São Paulo: Pearson, 2017.

BIRKS, John B. *The theory and practice of scintillation counting*. London: Pergamon Press, 1964.

KITTEL, Charles. *Introdução à Física do Estado Sólido*. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2005.

LADD, Mark. *Crystal Structures: Lattices and Solids in Stereoview*. 1. ed. Cambridge: Woodhead Publishing, 1999. 192 p.

CRYSTALLS. *Sodium iodide*. Disponível em: https://en.crystals.info/Sodium_iodide. Acesso em: 20 jan. 2025.

FILIPPONI, A. et al. *Local lattice relaxation around Tl substitutional impurities in a NaI(Tl) scintillator crystal*. *Radiation Physics and Chemistry*, v. 177, p. 108992, 2020.

BLACKLOCKS, A. et al. *Investigation into thallium sites and defects in doped scintillation crystals*. *Physica Status Solidi (c)*, v. 4, p. 1008–1011, 2007.

HOFSTADTER, R. *Alkali halide scintillation counters*. *Physical Review*, v. 74, n. 1, p. 100–101, 1948.

BREWER, R. (2009). *Criticality Calculations with MCNP5: A Primer*. Los Alamos National Laboratory

KULESZA, Joel Aaron; ADAMS, Terry R.; ARMSTRONG, Jerawan Chudoung; et al. *MCNP® Code Version 6.3.0 Theory & User Manual*. Los Alamos, NM, USA: Los Alamos National Laboratory, 2022.

DEMIR, Nilgün; KULUÖZTÜRK, Zehra Nur. *Determination of energy resolution for a NaI(Tl) detector modeled with FLUKA code*. *Nuclear Engineering and Technology*, v. 53, n. 11, p. 3759–3763, 2021.

GHAL-EH, Nima; ETAATI, Gholam R.; MOTTAGHIAN, M. *Monte Carlo Simulation of Inorganic Scintillators Response to Gamma Rays: A Comparative Study*. *World Applied Sciences Journal*, v. 8, n. 6, p. 784-788, 2010. ISSN 1818-4952.

SALGADO, C.M.; BRANDÃO, L.E.B.; SCHIRRU, R.; PEREIRA, C.M.N.A.; CONTI, C.C. *Validation of a NaI(Tl) detector's model developed with MCNP-X code*. *Progress in Nuclear Energy*, v. 59, p. 19-25, 2012.

HOANG DUC TAM, Nguyen Thi Hai Yen; LE BAO TRAN; HUYNH DINH CHUONG; TRAN THIEN THANH. *Optimization of the Monte Carlo simulation model of NaI(Tl) detector by Geant4 code*. *Applied Radiation and Isotopes*, v. 130, p. 75-79, 2017. ISSN 0969-8043.

SAITO, Kimiaki; MORIUCHI, Shigeru. *Monte Carlo calculation of accurate response functions for a NaI(Tl) detector for gamma rays*. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, v. 185, n. 1-3, p. 299-308, 1981. ISSN 0167-5087.

DETWILER, Rebecca S. et al. *Compendium of Material Composition Data for Radiation Transport Modeling*. Pacific Northwest National Laboratory (PNNL), Richland, WA, 2021. 2. ed.

TREFILOVA, L.N. et al. *Concentration dependence of the light yield and energy resolution of NaI:Tl and CsI:Tl crystals excited by gamma, soft X-rays and alpha particles*. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, v. 486, n. 1-2, p. 474-481, 2002. ISSN 0168-9002.

EISSA, M.; ALY, A. *Improve the efficiency of scintillation detectors using reflectors based on photonic crystals arrays*. *Journal of Electromagnetic Analysis and Applications*, v. 6, n. 2, p. 25-29, 2014.

SUERFU, Burkant et al. *Growth of ultra-high purity NaI(Tl) crystals for dark matter searches*. *Physical Review Research*, New York, v. 2, n. 1, p. 013223, fev. 2020. DOI: [10.1103/PhysRevResearch.2.013223](https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.2.013223).

LIMA, Claudio Jose de. *Crescimento, caracterização e aplicação de cristais de NaI(Tl) em detectores de radiação gama e raios-x*. 1990. Dissertação (Mestrado em Física Aplicada) - Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1990.

TARANYUK, V.; GEKTIN, A.; KISIL, I.; KOLESNIKOV, A. *NaI(Tl) and CsI(Tl) scintillation crystal growth by skull method*. *Journal of Crystal Growth*, v. 318, n. 1, p. 820-822, 2011. The 16th International Conference on Crystal Growth (ICCG16)/The 14th International Conference on Vapor Growth and Epitaxy (ICVGE14).

APENDICE - A

Segue as técnicas de propagação de erro usadas na soma das contagens e no cálculo da eficiência e resolução do detector. A propagação de um erro σ_u segue a fórmula geral de propagação para diversas variáveis (x_1, x_2, \dots, x_i):

$$\sigma_u^2 = \left(\frac{\partial u}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial x_2}\right)^2 + \dots + \left(\frac{\partial u}{\partial x_i}\right)^2$$

A.1 PROPAGAÇÃO DE SUBTRAÇÃO DO AJUSTE

O ajuste linear feito por python carrega uma incerteza nos seus parâmetros. Sendo o ajuste a reta $y = m \cdot \text{energy} + b$, com m e b possuindo suas respectivas incertezas, a incerteza propagada para cada ponto da reta y é:

$$\sigma_y = \sqrt{(\text{energy} * \sigma_m)^2 + (\sigma_b)^2}.$$

A subtração das contagens da resposta normal do *tally* com os pontos da reta também carregam uma incerteza. Cada ponto corrigido P pela subtração terá erro propagado definido por:

$$\sigma_p = \sqrt{(\sigma_c)^2 + (-\sigma_y)^2},$$

em que σ_c é o erro real do *tally* 8. Dessa forma, os erros propagados da subtração serão levados em consideração na propagação do erro final da soma do fóto pico.

A.2 PROPAGAÇÃO DE SOMA DE ERRO RELATIVO

Os erros gerados na simulação do MCNP são error relativos, ou seja, eles são uma estimativa do desvio padrão da medida dividido pela média daquele valor. No caso do *tally* 8, tem-se o número médio das contagens em certo bin de energia e seus respectivos erros. Dessa forma, para o cálculo da subtração do ajuste do contínuo de compton, da soma das contagens no fóto pico e do número total de contagens é necessário que se propague o erro real da somatória dos valores simulados. Sendo C_i as contagens e ε_i o respectivo erro relativo no bin de energia i , a propagação do erro da somatória dos erros relativos S é igual a:

$$\sigma_S = \sqrt{(C_1 \cdot \varepsilon_1)^2 + (C_2 \cdot \varepsilon_2)^2 + \dots + (C_i \cdot \varepsilon_i)^2}$$

A.3 PROPAGAÇÃO DE ERRO DE RAZÃO

Para o cálculo da resolução e da eficiência é necessário fazer uma operação simples de divisão. Para uma razão r entre x e y , temos:

$$\sigma_r = \sqrt{(\sigma_x / y)^2 + (-\sigma_y \cdot x / y^2)^2}$$

Quadro 2: Input de cristal pequeno para fonte de 1,17 MeV.

```

Teste MCNP
C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C
C
C
C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C
C
C   Cells
C -----
C   NaI(Tl) crystal
1   1  -3.667  1 -2 -3
C -----
C   MgO powder reflector
2   3  -2.000  ( 3 -5 1 -2): $ lateral
                ( 2 -4 -5 )  $ front disk
C -----
C   Aluminum can
3   2  -2.6989 ( 5 -7 1 -4): $ lateral
                (-7 4 -6 )  $ front disk
C -----
C   Photomultiplier tube
4   2  -2.6989  8 -1 -7      $ tube
C -----
C   Room
5   4   0.00005 ( 7 -9 8 -6): $ around the detector
                ( 6 -9      ): $ beyond the detector right
                (-8 -9      )
C -----
C   Outside Room
6   0          9
C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C
C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C
C
C Surfaces
C -----
C   Crystal small
1   px  0          $ back face of crystal
2   px  2.00       $ front face of crystal
3   cx  1.55       $ cylinder crystal
C -----
C   MgO powder reflector
4   px  2.30
5   cx  1.85
C -----
C   Aluminum can
6   px  2.40       $ front face can 0.8 mm thickness
7   cx  2.05       $ lateral can 0.8 mm thickness
C -----
C   Photomultiplier tube
8   px  -3         $ Aluminum equivalent to photo tube
C -----
C   Ambient
9   so  15         $ 50 meters room
C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C C

```

