MODELAGEM MONTE CARLO DE CINTILADORES INORGÂNICOS Ce^{3+} PARA DETECÇÃO DE RAIOS X E RADIAÇÃO GAMA

Iago Bernardi Bordin (PIBIC-AF-IS/CNPq-FA); Juliana de Campos Freitas (orientadora); Caio Vinicius de Oliveira.
E-mail: jcfreitas@uem.br
Universidade Estadual de Maringá, Centro de Ciências Exatas, Maringá, PR.

Área e subárea do conhecimento: Física / Física Nuclear

Palavras-chave: transporte óptico; eficiência quântica de detecção; simulação Monte Carlo.

RESUMO

A simulação Monte Carlo permite avaliar o desempenho de detectores cintiladores antes da etapa experimental. Neste trabalho, desenvolveu-se um modelo em GATE/OpenGATE e Geant4 para caracterizar a eficiência quântica de detecção dos cintiladores YAG:Ce e GAGG:Ce em função da energia e da espessura. Foram simuladas 40 espessuras, entre 0,5 e 20,0 mm, e energias de 5 a 662 keV para o YAG:Ce e de 30 a 662 keV para o GAGG:Ce. Entre 30 e 122 keV, o desvio relativo médio frente ao NIST XCOM foi de 1,50% para YAG:Ce e 0,71% para GAGG:Ce. Em ambos os materiais, a eficiência aumentou com a espessura e, em geral, diminuiu com a energia, reproduzindo-se também as bordas K do ítrio e do gadolínio. Acima de 122 keV, as discrepâncias aumentaram, associadas à baixa estatística de 100 fótons por condição. Os resultados fornecem base para a otimização computacional desses cintiladores.

INTRODUÇÃO

Detectores cintiladores convertem parte da energia depositada pela radiação ionizante em fótons ópticos, posteriormente registrados por fotodetectores. A resposta do sistema depende de propriedades como composição química, densidade, rendimento luminoso, índice de refração, absorção óptica e condições de superfície. Entre os materiais de interesse destacam-se *garnets* dopados com cério (Ce^{3+}), nos quais diferenças na sua composição resultam em comportamentos distintos diante de fótons de radiação ionizante. Métodos de simulação computacional Monte Carlo permitem investigar essas respostas em condições controladas e reprodutíveis. O Geant4 fornece modelos para o transporte e a interação de partículas na matéria (ALLISON et al., 2016), enquanto o GATE/OpenGATE oferece uma estrutura voltada a aplicações em Física Médica (SARRUT et al., 2014). No transporte óptico, a descrição da produção e da propagação da luz de cintilação é particularmente importante para a resposta final do detector (HARTWIG; GUMPLINGER, 2014). Assim, este trabalho teve como

objetivo modelar ambiente de simulação para caracterizar a eficiência quântica de detecção dos cintiladores YAG:Ce ($Y_3Al_5O_{12}:Ce^{3+}$) e GAGG:Ce ($Gd_3Al_2Ga_3O_{12}:Ce^{3+}$) em função simultânea da energia incidente e da espessura, estabelecendo uma base para a comparação quantitativa entre os materiais.

MATERIAIS E MÉTODOS

As simulações Monte Carlo foram realizadas em GATE/OpenGATE 10.2, utilizando Geant4 11.2 e rotinas de automação e análise em Python 3.13. O modelo físico incluiu efeito fotoelétrico, espalhamento Compton e transporte de partículas secundárias. A física óptica foi ativada por meio do 'G4OpticalPhysics', contemplando a geração de fótons de cintilação e Cerenkov, bem como processos de absorção, espalhamento e interação em interfaces ópticas (ALLISON et al., 2016; GEANT4 COLLABORATION, 2023). Foi executada uma varredura paramétrica em função da energia incidente e da espessura dos cristais cintiladores, considerando 40 espessuras diferentes definidas entre 0,5 e 20,0 mm, em passos de 0,5 mm, e energias de 5 a 662 keV para o YAG:Ce, incluindo a borda K do ítrio (~17 keV), e de 30 a 662 keV para o GAGG:Ce. Cada condição utilizou 100 fótons primários. A eficiência quântica de detecção (A_Q), definida como a probabilidade de interação do fóton incidente com o cintilador, foi estimada pela razão entre o número de fótons primários que interagiram e o número total de fótons primários simulados. Para comparação com os resultados Monte Carlo, foram obtidos da base de dados NIST XCOM (BERGER et al., 2010) os coeficientes de atenuação dos materiais, utilizados no cálculo da eficiência quântica de detecção de referência, expressa por:

$$A_Q = 1 - e^{-\mu x} \quad \text{(Eq.1)}$$

Onde μ representa o coeficiente de atenuação linear e x a espessura do cristal (IAEA, 2014).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

As Figuras 1 e 2 apresentam a eficiência A_Q obtida por Monte Carlo e a referência calculada com coeficientes do NIST XCOM para YAG:Ce e GAGG:Ce, respectivamente, em 5-662 keV (YAG:Ce) e 30-662 keV (GAGG:Ce), para 40 espessuras de 0,5 a 20,0 mm. Em ambos os cristais, A_Q aumenta com a espessura e, de modo geral, diminui com a energia, refletindo a menor probabilidade de interação dos fótons mais penetrantes. A Tabela 1 evidencia o efeito conjunto da energia e da espessura sobre a eficiência. Em 30 keV, ambos os materiais apresentam elevada eficiência mesmo em pequenas espessuras. Em 122 e 330 keV, o GAGG:Ce apresenta maior A_Q que o YAG:Ce, enquanto em 662 keV os valores se aproximam nas maiores espessuras. As simulações também reproduzem descontinuidades associadas às bordas K dos elementos constituintes, com destaque para Y no YAG:Ce e Gd no GAGG:Ce, em concordância com a referência.

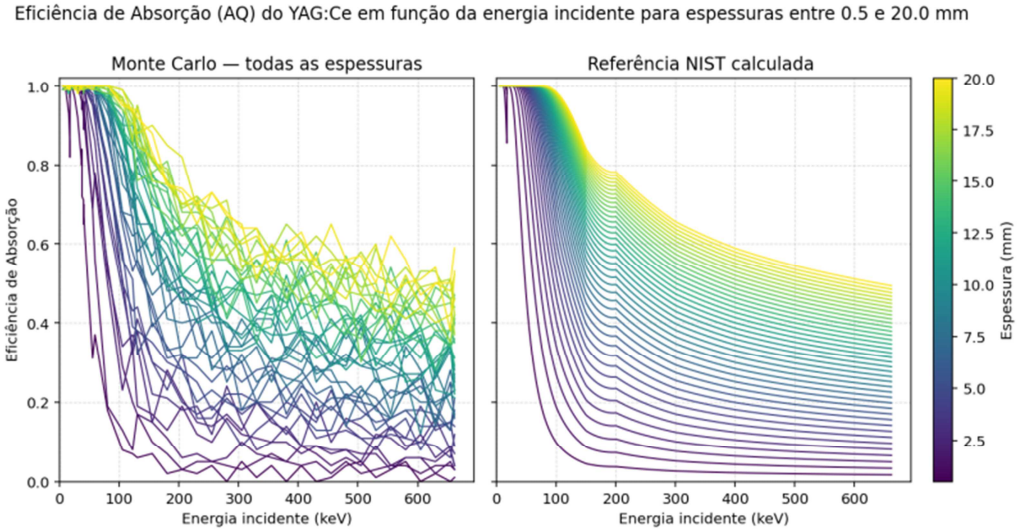


Figura 1 - Eficiência de absorção em função da energia incidente para espessuras entre 0,5 e 20,0 mm: resultados Monte Carlo e referência calculada. Fonte: autoria própria (2026).

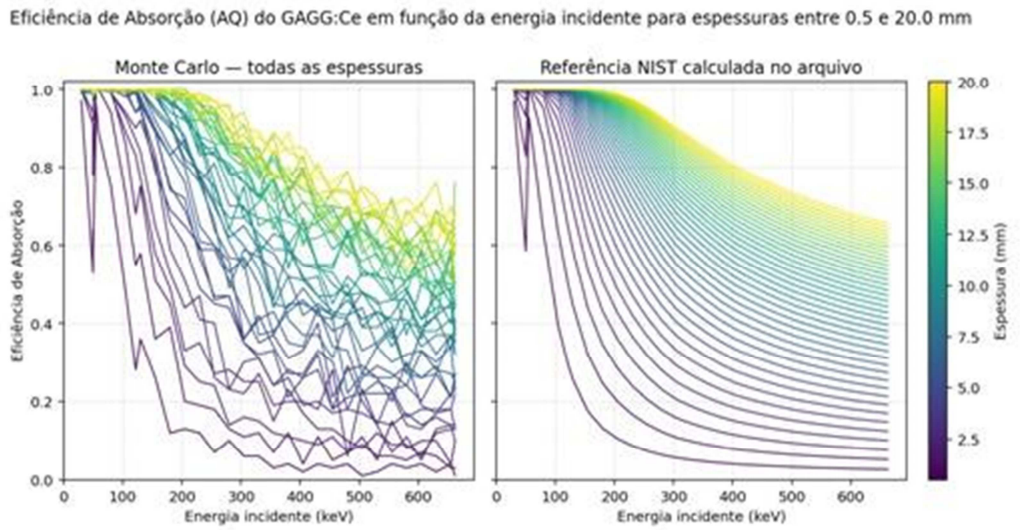


Figura 2 - Eficiência de absorção do GAGG:Ce em função da energia incidente para espessuras entre 0,5 e 20,0 mm: resultados Monte Carlo e referência calculada. Fonte: autoria própria (2026).

Entre 30 e 122 keV, o erro relativo médio foi de 1,50% para YAG:Ce e 0,71% para GAGG:Ce, com 91,6% e 96,3% dos pontos, respectivamente, abaixo de 5%. De 130 a 662 keV, esses erros aumentaram para 13,3% e 8,6%, sobretudo nas condições de baixa eficiência, embora os desvios absolutos médios tenham permanecido em 0,035 e 0,033. Com apenas 100 fótons primários por condição, a incerteza binomial pode atingir aproximadamente 0,05 quando $A_Q \approx 0,5$, contribuindo para a dispersão ponto a ponto e indicando a necessidade de maior números de histórias em alta energia.

Tabela 1 - Eficiência Monte Carlo (A_Q) em energias representativas da varredura.

Material	Esp. (mm)	30 keV	122 keV	330 keV	662 keV

YAG:Ce	0,5	0,86	0,07	0,01	0,01
	1,00	1,00	0,08	0,05	0,03
	5,0	1,00	0,51	0,20	0,17
	10,0	1,00	0,74	0,35	0,28
	20,0	1,00	0,94	0,64	0,59
GAGG:Ce	0,5	0,97	0,28	0,06	0,01
	1,0	1,00	0,55	0,12	0,03
	5,0	0,99	1,00	0,42	0,27
	10,0	0,99	1,00	0,67	0,39
	20,0	1,00	1,00	0,88	0,58

CONCLUSÕES

A modelagem caracterizou a dependência de A_Q com a energia e a espessura nos cristais YAG:Ce e GAGG:Ce e reproduziu as bordas K do ítrio e do gadolínio. A melhor concordância com o NIST ocorreu entre 30 e 122 keV, com erros médios de 1,50% e 0,71%, respectivamente. Em energias mais altas, o GAGG:Ce apresentou maior eficiência sobretudo em espessuras intermediárias, enquanto em 20,0 mm e 662 keV os materiais mostraram valores semelhantes. As discrepâncias acima de 122 keV são influenciadas pela baixa estatística de 100 fótons por condição, especialmente quando A_Q é pequeno. O aumento do número de partículas deverá reduzir as flutuações e fortalecer a validação até 662 keV.

AGRADECIMENTOS

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pela concessão da bolsa de Iniciação Científica, e à Universidade Estadual de Maringá (UEM), pelo apoio institucional.

REFERÊNCIAS

ALLISON, J. et al. Recent developments in Geant4. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A**, v. 835, p. 186-225, 2016. DOI: 10.1016/j.nima.2016.06.125.

BERGER, M. J.; HUBBELL, J. H.; SELTZER, S. M. et al. XCOM: Photon Cross Section Database. Gaithersburg: National Institute of Standards and Technology, 2010.

GEANT4 COLLABORATION. Geant4 Book for Application Developers: Optical Photon Processes. Geant4 Release 11.2, 2023.

HARTWIG, Z. S.; GUMPLINGER, P. Simulating response functions and pulse shape discrimination for organic scintillation detectors with Geant4. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A**, v. 737, p. 155-162, 2014.

IAEA. Diagnostic Radiology Physics: A Handbook for Teachers and Students. Vienna: IAEA, 2014. STI/PUB/1564.

SARRUT, D. et al. A review of the use and potential of the GATE Monte Carlo simulation code for radiation therapy and dosimetry applications. **Medical Physics**, v. 41, n. 6, p. 064301, 2014.