

06.88.08

CNEA-AC 2/88

COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
Gerencia de Protección Radiológica y Seguridad
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
Facultad de Ingeniería
MINISTERIO DE SALUD Y ACCION SOCIAL
Dirección Nacional de Calidad Ambiental

ESPECTROMETRIA DE ENERGIA

Miguel RIGHETTI y Aníbal BONINO

Apuntes para el curso de Post-grado
en Protección Radiológica y Seguridad Nuclear

Buenos Aires-Argentina
1988

Espectrometría de Energía

Aspectos estadísticos

Consideremos una fuente que emite partículas y sea x el número de partículas emitidas en el intervalo $[0, t)$. El modelo probabilístico que se puede asociar a este fenómeno debe corresponder a la aparición de sucesos aislados sobre un continuo.

La función de probabilidad de Poisson describe, en forma muy satisfactoria, bajo ciertas condiciones, estos casos y su función de probabilidad está dada por la expresión:

$$P(x = k) = \frac{\lambda^k e^{-\lambda}}{k!}$$

donde λ mide el promedio de apariciones de un suceso.

Las condiciones que se deben cumplir son:

- 1) Para una función de distribución dada, las probabilidades de un número de ocurrencias en dos intervalos de igual medida deben ser iguales.
- 2) La distribución del número de partículas emitidas durante un intervalo de tiempo cualquiera depende sólo de la longitud del intervalo.
- 3) El número de ocurrencias en un intervalo puede ser tan grande como se quiera.
- 4) Para intervalos suficientemente pequeños, la probabilidad de obtener exactamente una emisión es directamente proporcional a la longitud del intervalo.
- 5) La probabilidad de obtener dos o más emisiones en un intervalo suficientemente pequeño es despreciable.

Bajo estas condiciones, el número λ es el promedio de ocurrencias en dicho intervalo o sea que puede asimilarse al número de partículas emitidas por intervalo de tiempo. Recordemos que para una distribución de Poisson de parámetro λ , la esperanza matemática y la varianza son iguales a λ .

Aproximación de la distribución de Poisson mediante una distribución normal.

Si x es una variable aleatoria que sigue una Poisson con parámetro λ e y es otra variable aleatoria con distribución normal de parámetros μ, σ y además λ es mayor que 10, haciendo:

$$\mu = \sigma \quad \text{y} \quad \sigma = \sqrt{\lambda}$$

se verifica que:

$$\begin{aligned} P(x = k) &\approx P(k - 0,5 \leq y \leq k + 0,5) & k \geq 1 \\ P(a \leq x \leq b) &\approx P(a - 0,5 \leq y \leq b + 0,5) \\ P(x = 0) &\approx P(y \leq 0,5) \end{aligned}$$

por lo tanto, si B es el número de cuentas emitidas en el intervalo $[0, t)$ podemos decir que $\mu = \lambda = B$ y $\sigma = \sqrt{B}$. El intervalo del 95% de confianza será entonces:

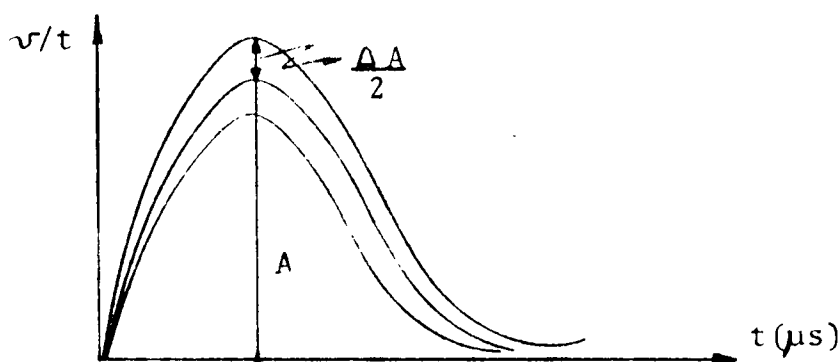
$$B \pm 1,96 * \sqrt{B}$$

Concepto de espectro y factores que intervienen en su formación.

En aplicaciones radioquímicas o de física nuclear es necesario, a veces, conocer la distribución energética de las radiaciones electromagnéticas emitidas (espectro de energías) por una muestra. Para determinar el espectro de un emisor dado, se debe contar con un dispositivo que entregue una respuesta proporcional a la energía de la radiación incidente. La utilización de cristales de ioduro de sodio permite determinar la energía y la intensidad de la radiación incidente valiéndose de una calibración adecuada.

Ya se ha visto que, cuando la radiación gamma penetra en un cristal centellador puede sufrir interacciones de tipo fotoeléctrico, Compton o producción de pares, dejando en el cristal toda su energía o una fracción de ella. La señal de salida al ser analizada por el espectrómetro correspondiente, genera una distribución continua debida a la fracción de energías absorbidas en el cristal por interacción Compton y un fotopico creado por absorción total debida a interacciones por efecto fotoeléctrico.

Al incidir en un cristal un haz de fotones monoenergéticos, el centellador acusará su absorción por medio de un conjunto de pulsos, en principio de igual amplitud. Sin embargo, experimentalmente se puede observar a la salida del fotomultiplicador un conjunto de pulsos cuya amplitud varía en un valor $A \pm \Delta A/2$



Esta variación de amplitudes se debe a las fluctuaciones estadísticas que ocurren en los procesos involucrados en el sistema cristal centellador fotomultiplicador siendo los principales:

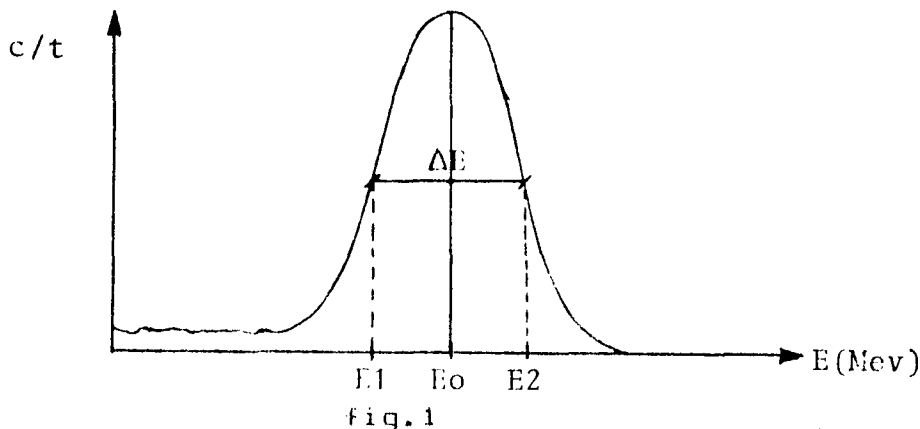
- 1) Los fotoelectrones producidos en la interacción son emitidos en diferentes direcciones, por lo cual los fotones fluorescentes se producen en diferentes partes de volumen y llegan al fotocátodo directamente, por reflexión o son absorbidos en el centellador alterando su estadística.
- 2) No todos los fotones producen el mismo número de fotones luminiscentes dado que no todos interactúan con el mismo número de átomos.
- 3) Los fotones fluorescentes tienen distinto recorrido en el cristal.
- 4) El número de electrones producidos en el fotocátodo por fotón incidente es variable.
- 5) Cada fotoelectrón puede producir un número diferente de electrones secundarios en las etapas de multiplicación del fotomultiplicador.

Como consecuencia de la fluctuación en la altura de pulsos, el analizador registrará un cierto número de estos para cada amplitud. Se obtiene así una distribución de alturas o espectro de pulsos, que tiene la forma aproximada de una campana de Gauss (fig1). Al canal correspondiente al máximo se le asigna la amplitud E_0 del pulso, debido a la energía total absorbida. El ancho del pico a mitad de altura ΔE es una medida de la fluctuación total de la amplitud de pulsos y depende de la energía absorbida. Se define en consecuencia, para un sistema dado, la "resolución" para una determinada energía como el ancho a mitad de altura dividido la amplitud, expresada porcentualmente.

$$R \text{ (Resolución)} = (\Delta E / E_0) * 100$$

Para el cálculo de la actividad de la fuente emisora es necesario conocer el área bajo la gaussiana (fotopico). Se utiliza para ello, el concepto de banda de integración tomándose en general $1.96 * \sqrt{V}$ a ambos lados del máximo lo que nos da el 95% del área.

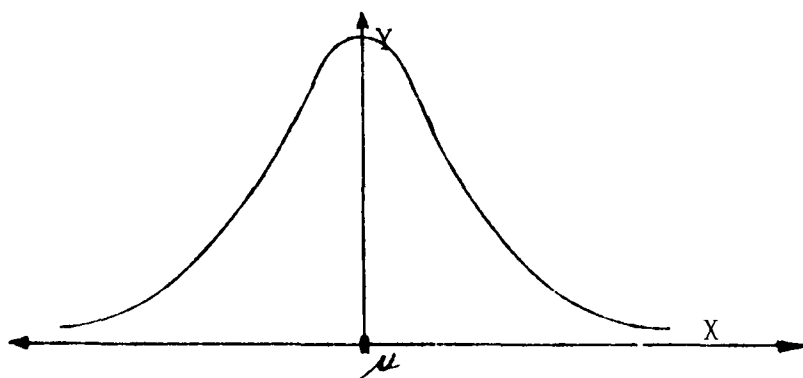
Cálculo de resolución y banda de integración.



$$R = \frac{\text{Ancho del fotopico a mitad de altura}}{\text{Energía del máximo}} = \frac{E_2 - E_1}{E_0}$$

El cálculo del ancho de banda de integración que corresponde al 95% del área del fotopico, se basa en la aproximación de éste por una distribución normal, o sea

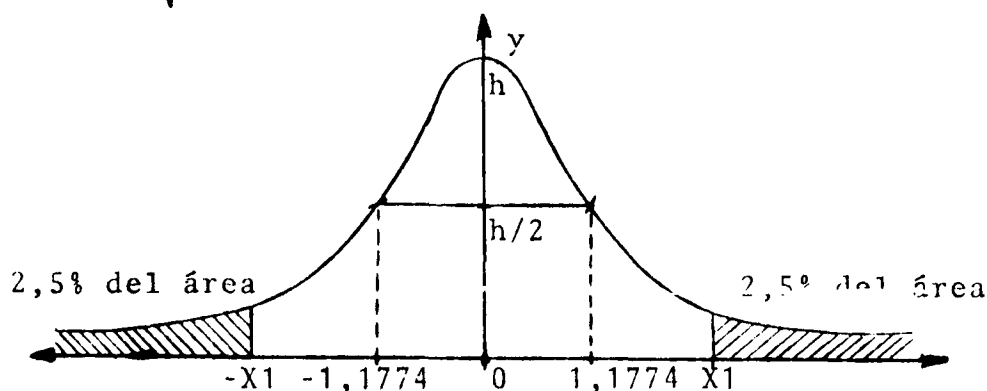
$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} * \sqrt{V}} * \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x - u}{\sqrt{V}} \right)^2 \right] \quad \text{para } -\infty < x < \infty$$



En este caso se dice que x es una variable aleatoria con distribución normal de valor medio μ y varianza σ^2 ($N[\mu, \sigma^2]$). Si $\mu=0$ y $\sigma^2=1$ x tiene una distribución $N[0,1]$, su máximo está en $x=0$ y la ordenada correspondiente es $1/\sqrt{2\pi}$.

Para calcular el ancho a mitad de altura se recurre a:

$$y = \frac{h}{2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right) \implies x = \pm 1,17741$$

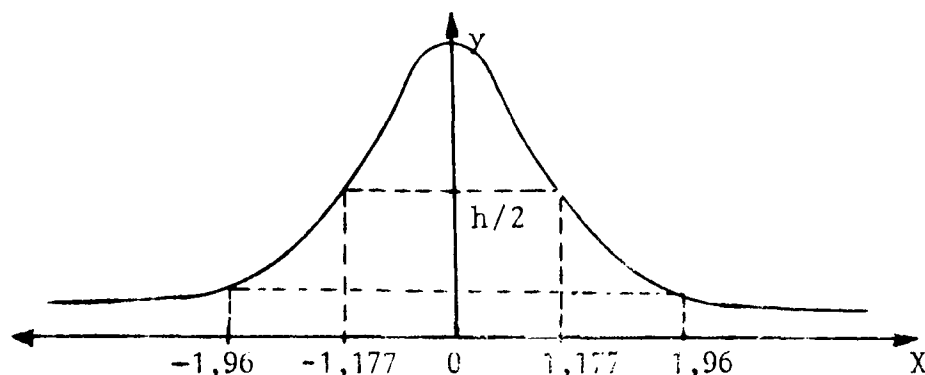


Interesa ahora encontrar un valor x_1 tal que el 95% del área quede comprendida en el intervalo $[-x_1, x_1]$. En consecuencia x_1 debe verificar que:

$$\int_{-\infty}^{x_1} f(x) dx = 1 - 0,025 \quad \text{y} \quad \int_{-\infty}^{-x_1} f(x) dx = 0,025$$

En una tabla de valores para una $N[0,1]$ se obtiene:

$$x_1 = 1,96$$



Relacionando el ancho a mitad de altura con el ancho correspondiente al 95% del área obtenemos:

$$\frac{\text{Ancho 95\%}}{3,92} = \frac{\text{Ancho a mitad de altura.}}{2,354}$$

$$\text{Ancho 75\%} = 1,665 * \text{ancho a mitad de altura}$$

Recordando la definición de resolución obtenemos:

$$\text{Ancho 95\%} = 1,67 * R * EO$$

Cálculo de eficiencia

La eficiencia de un sistema para una determinada geometría se define como:

$$Ef = \frac{\text{cuentas netas por unidad de tiempo}}{\text{actividad de la fuente}}$$

Límite de detección.

Es la actividad mínima significativa medida y representa la menor medición digna de reportarse como mayor que cero.

Daremos ahora un cálculo de ella de acuerdo con las siguientes hipótesis:

- 1) Se supone una distribución de Poisson
- 2) Existe un tiempo fijo de conteo para las observaciones individuales (esto permite trabajar directamente con número de cuentas).
- 3) El tiempo de conteo es lo suficientemente largo como para permitir una distribución del número de cuentas que pueda aproximarse por una distribución normal de valor medio y varianza igual al número de cuentas esperado.

Si conocemos con exactitud el fondo, el valor medido de la muestra es $(B''+S'')-B$ donde:

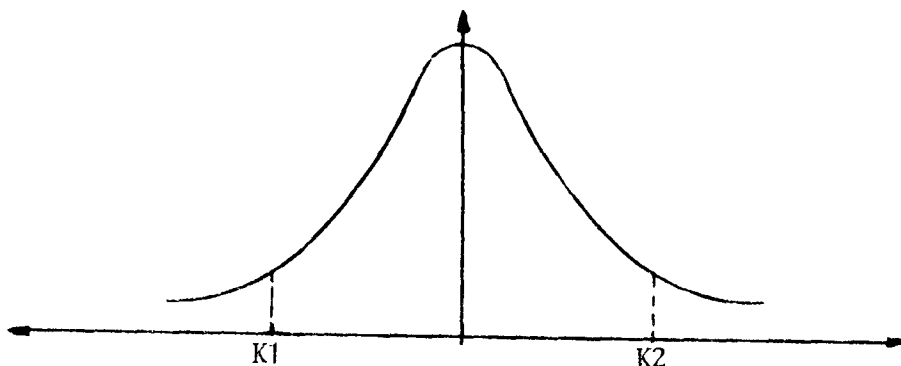
B'' = Fondo medido

B = Fondo esperado

$(B''+S'')$ = Valor medido de la muestra

S = Valor estimado de la muestra

Por hipótesis, dado que $(B''+S'')$ se distribuye normalmente la cantidad $((B''+S'')-B-S)/\sqrt{(B+S)}$ se distribuye como una variable $N(0,1)$.



Por lo tanto:

$$P(x \leq k_1) = P\left\{\frac{(B''+S'')-B-S}{\sqrt{(B+S)}} \leq k_1\right\} = P\left\{(B''+S'')-B-S \leq k_1 * \sqrt{(B+S)}\right\}$$

$$P(x \geq k_2) = P\left\{\frac{(B''+S'')-B-S}{\sqrt{(B+S)}} \geq k_2\right\} = P\left\{(B''+S'')-B-S \geq k_2 * \sqrt{(B+S)}\right\}$$

Si consideramos $S=0$, $\Delta = (B''+S'')-B$ como la mínima diferencia de conteaje significativa y B como la mejor estimación de $(B''+S'')$ resulta:

$$\Delta \leq k_1 * \sqrt{B} \quad \text{y} \quad \Delta \geq k_2 * \sqrt{B}$$

por lo tanto:

$$\Delta \leq k_1 * \sqrt{B} \leq (k_1 + |k_2|) * \sqrt{B}$$

entonces podemos tomar

$$\Delta = (k_1 + |k_2|) * \sqrt{B}$$

de donde

$$LD = \frac{(k_1 + |k_2|)}{E_f * t} * \sqrt{B}$$

Si tomamos un nivel de confianza del 95%, $k_1 = k_2 = 1,96$ entonces:

$$LD = \frac{3,92 * \sqrt{B}}{E_f * t}$$

Forma del espectro para radiación electromagnética hasta 100 Kev.

Para un rango de energías entre los 10 y 100 Kev, el efecto fotoeléctrico es preponderante. (ver Fig 2). Ocurrido éste, el fotoelectrón es absorbido en un espesor muy pequeño del cristal dejando una energía dada por:

$$E_f = E_0 - 33 \text{ kev}$$

siendo E_0 la energía del fotón incidente y 33 Kev la energía de ligadura de la capa K del átomo del yodo. Cuando E_0 es menor que este valor, el efecto ocurre en la capa L. De esta forma el átomo de yodo queda ionizado y se produce una restructuración con la consiguiente emisión de radiación. Por otra parte el electrón resultante excita gran cantidad de átomos, que se desexcitan emitiendo radiación de fluorescencia. Si todas estas radiaciones interactúan dentro del cristal la energía total absorbida es:

$$E_a = (E_o - B_k) + (B_k - B_l) + (B_l - B_m) + \dots = E_o$$

siendo $B_k \dots B_m$ las energías de ligaduras de las capas $K \dots M$.

En consecuencia, dado que la probabilidad de que una radiación de 50 Kev no sea absorbida en 2 mm del cristal es e^{-1} , podemos considerar que la radiación de fluorescencia no escapa del cristal y la energía total absorbida es E_o .

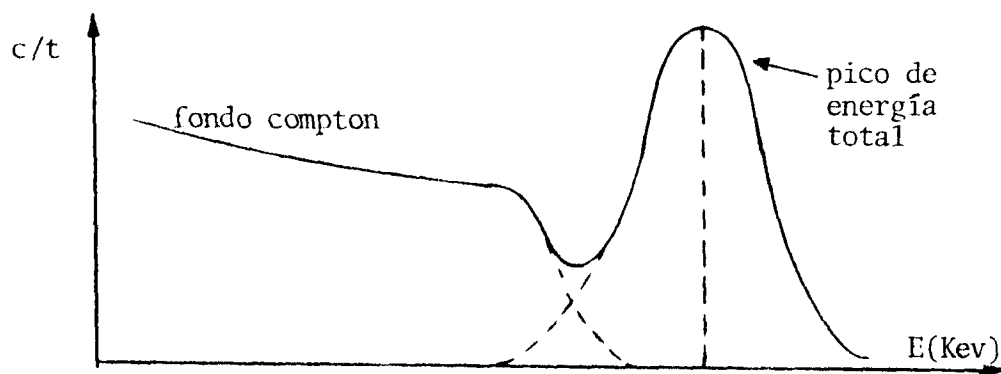
Forma del espectro para radiación electromagnetica entre 100 y 1000 Kev.

Para energías superiores a 100 kev, el efecto compton es apreciable, siendo preponderante para energías superiores a 1 Mev. (ver Fig 2). Por lo tanto, algunos fotones incidentes pueden interactuar por efecto compton, otros por fotoeléctrico y otros no interactúan. Los que interactúan por efecto compton dan lugar a la emisión de un fotón secundario dentro del cristal que puede: 1) Escapar del cristal. 2) Interactuar por efecto fotoeléctrico. 3) interactuar por efecto compton produciendo otro fotón secundario que generando una secuencia de sucesivas combinaciones de efecto compton hasta que se produce la absorción final por efecto fotoeléctrico.

Todos estos procesos dan lugar a una absorción total o parcial de la energía incidente. Como consecuencia a la salida del fotomultiplicador se observaran pulsos correspondientes a la energía total absorbida y pulsos correspondientes a la absorción parcial.

Cuando el analizador clasifica estos pulsos por su altura se obtiene un pico de energía total (E_o) y un espectro continuo llamado fondo compton.

Existe además una zona del espectro que se denomina borde compton y esta dada por la máxima energía que el fotón incidente puede transferirle al electrón $\theta = 180^\circ$.



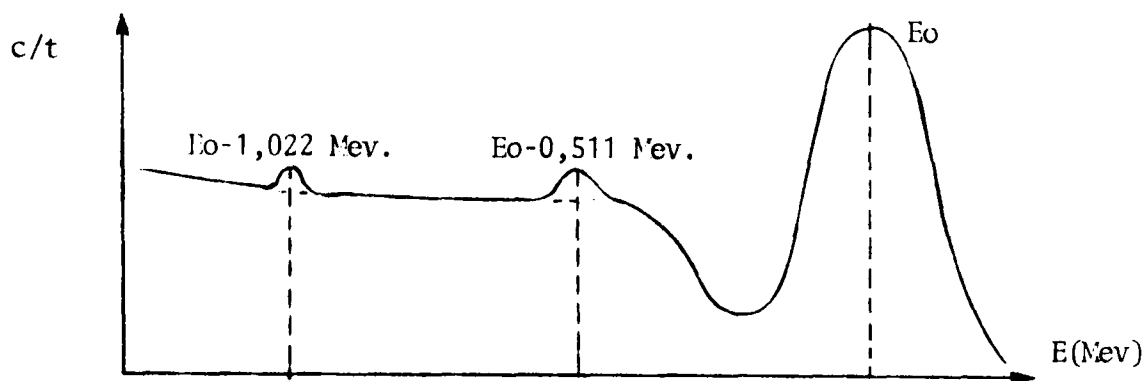
Forma del espectro para energías superiores a 1,022 Mev.

En este rango de energías existe ya probabilidad de interacción por formación de pares, por lo tanto, el haz de fotones incidentes puede interactuar por cualquiera de los tres procesos conocidos: fotoeléctrico, compton y formación de pares. (ver Fig 2).

En este ultimo caso, cuando el positrón llega al reposo, se aniquila dando lugar a dos radiaciones de 0,511 Mev, pudiendo éstas no ser absorbidas, o serlo en forma total o parcial.

Los pulsos producidos por estas interacciones dan lugar a tres picos de amplitudes bien definidas:

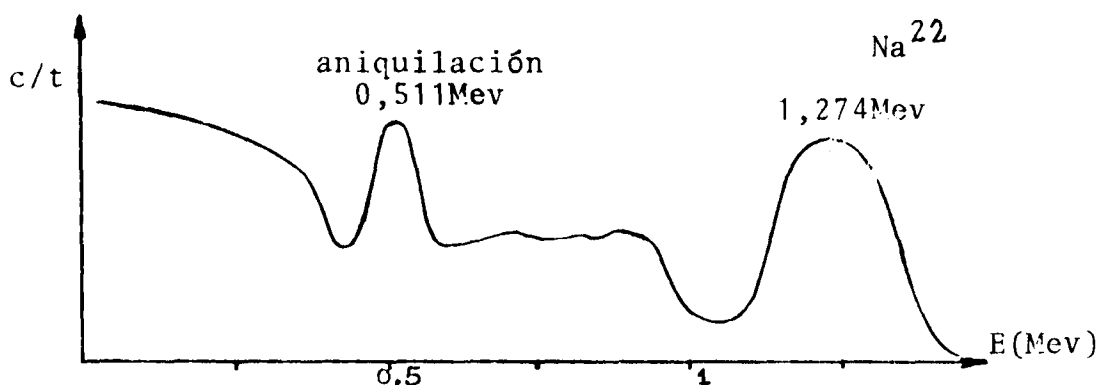
- 1) Un pico que corresponde a absorción total el que además esta formado por contribución compton y fotoeléctrico por lo que es el más intenso.
- 2) Un segundo pico que corresponde al escape de una radiación de aniquilación y corresponde a una energía $E_0 - 0,511$ Mev.
- 3) un tercer pico correspondiente al escape de las dos radiaciones de aniquilación con una energía $E_0 - 1,022$ Mev.



Espectro acompañado por radiación de aniquilación

Si los fotones incidentes tienen una energía inferior a 1,022 Mev. pero la fuente se desintegra por β^+ , el positrón puede interactuar con el medio o el cristal y dar lugar a las dos radiaciones de aniquilación. Si una de ellas es detectada por el cristal el analizador dará cuenta, además del pico de energía total y del fondo compton, y un pico cuya energía es 0,511 Mev.

Si la fuente no se desintegra por emisión β^+ pero su energía es superior a 1,022 Mev, puede detectarse este pico dado que existe la probabilidad de que la radiación gamma interactúe por formación de pares con el medio o el cristal y el positrón producido se aniquile en el medio dando lugar a radiación de aniquilación que puede ser detectada.



Pico por detección de radiación retrodispersada

Además de penetrar en el cristal radiación primaria proveniente de la fuente radioactiva, también penetra radiación secundaria generada por interacción compton de la primera en las inmediaciones del cristal (fotones secundarios)

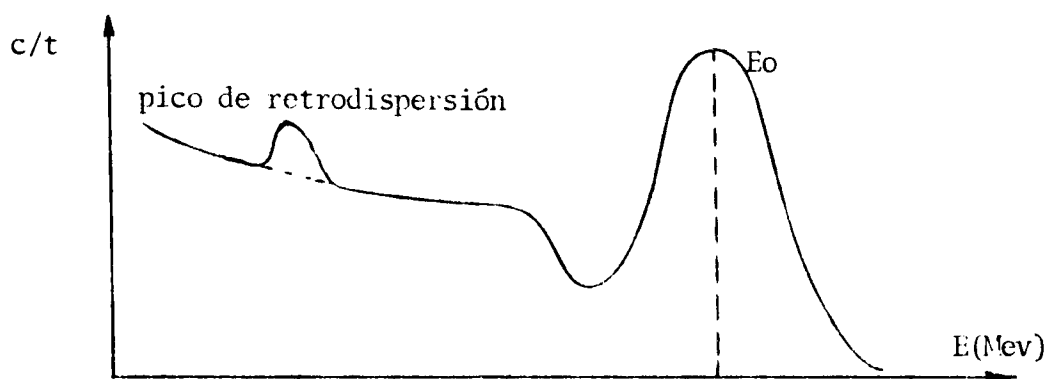
Estos fotones tienen una energía que depende el ángulo θ con respecto de la dirección principal del fotón primario dada por:

$$E = \frac{E_0}{1 + \alpha(1 - \cos \Theta)} \quad \alpha = \frac{E_0}{0,511 \text{ MeV.}}$$

Si sólo consideramos los fotones retrodispersados entre 180° y 150° y consideremos una radiación primaria de 0,661 Mev (Cs-137) se obtiene que

$$0,185 \text{ Mev} < E < 0,194 \text{ Mev}$$

lo que indica que los fotones retrodispersados tienen una energía aproximadamente igual dentro de un error de 10 Kev, dando lugar a pulsos de una amplitud relativamente constante por lo que el analizador acusará un pico de energía promedio de 0,190 Mev.



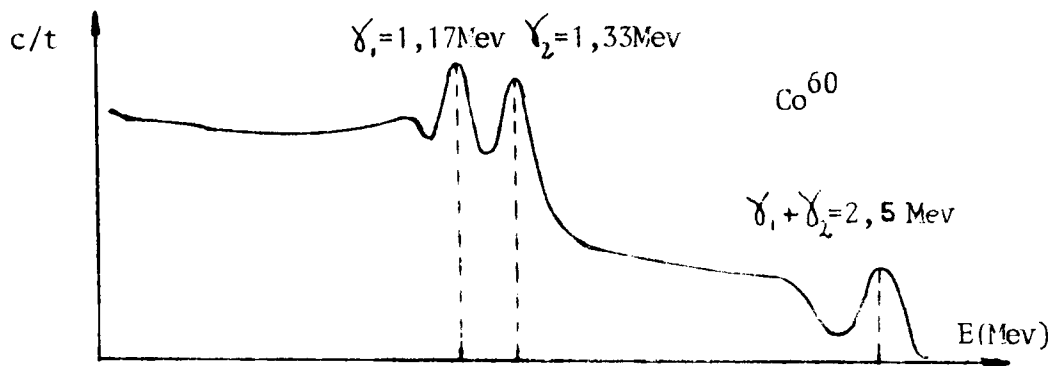
Pico por detección simultanea de dos radiaciones

Algunas condiciones geométricas y la alta actividad de la fuente dan lugar a que el cristal detecte en forma simultánea radiaciones, generando un pulso de amplitud correspondiente a la suma de las energías de esas radiaciones.

Este pulso, al ser analizado en el multicanal, registra un pico de una energía superior a las emitidas por la fuente.

La detección simultánea de dos radiaciones tiene dos orígenes diferentes:

- 1) Detección de dos radiaciones emitidas en cascada.
- 2) Detección simultánea de dos radiaciones emitidas por dos núcleos diferentes.

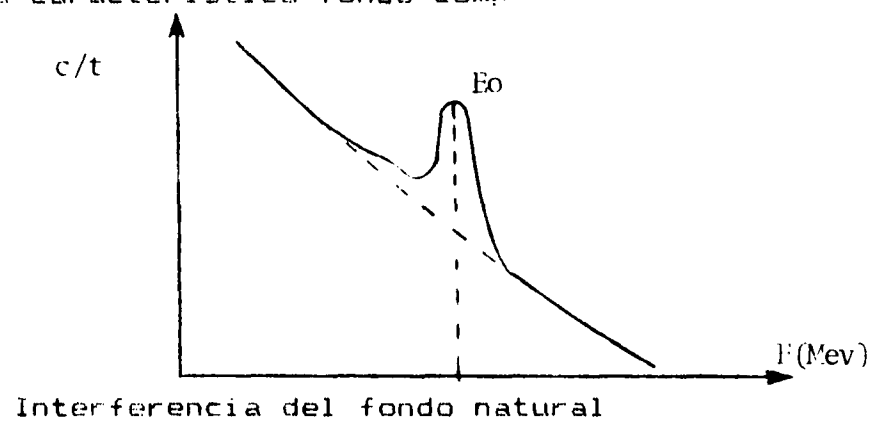


Interferencia Bremsstrahlung.

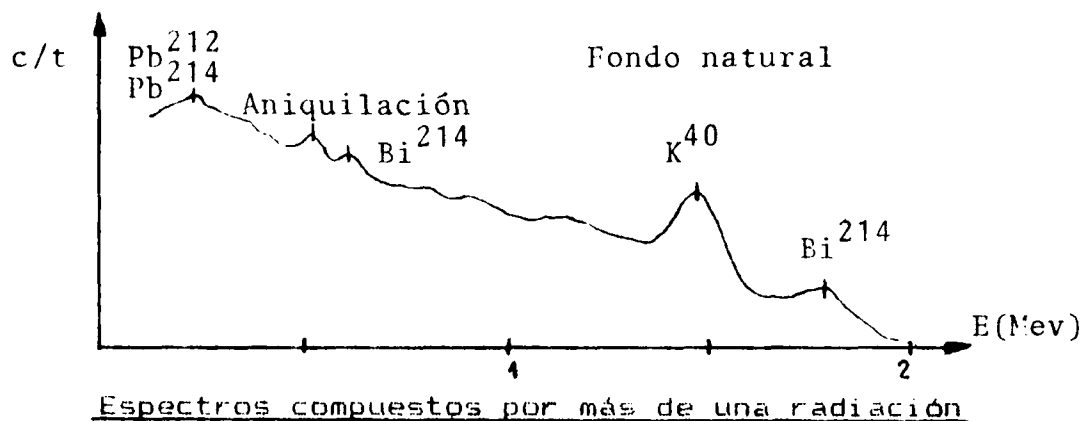
Un espectro de radiación electromagnética puede aparecer

deformado por la detección simultánea de radiación de frenamiento (bremsstrahlung), en particular en casos de radiación gamma poco intensa en presencia de emisión beta intensa de alta energía.

En estos casos los electrones, al frenarse en el absorbente interpuesto entre la fuente y el cristal, producen radiación de frenamiento la cual penetra en éste. Se produce así un fenómeno de apilamiento entre la radiación de frenamiento y la primaria por lo que el pico de energía total se encuentra superpuesto a fondo que desfigura totalmente la forma característica fondo compton.



Cuando se desea medir radiación gamma muy poco intensa la detección simultánea del fondo natural de radiación puede dificultar la detección. En estos casos, es indispensable registrar un buen espectro de fondo para determinar los picos que lo componen. Los elementos naturales que en general interfieren pertenecen a la cadena natural del uranio y del torio a los que se debe agregar el K-40.



Es común registrar espectros de radiación electromagnética compuestos por varios picos.

Cuando se trata de picos bien distanciados es fácil asociar su posición a una energía mediante una relación establecida experimentalmente sobre espectros conocidos y luego calcular la actividad a través del área bajo cada fotopico.

En caso que los fotopicos no estén distanciados resulta más difícil la identificación y cuantificación del emisor ya que deben desarmarse los picos compuestos en picos individuales.

En la actualidad existen métodos computacionales para resolver este tipo de análisis.

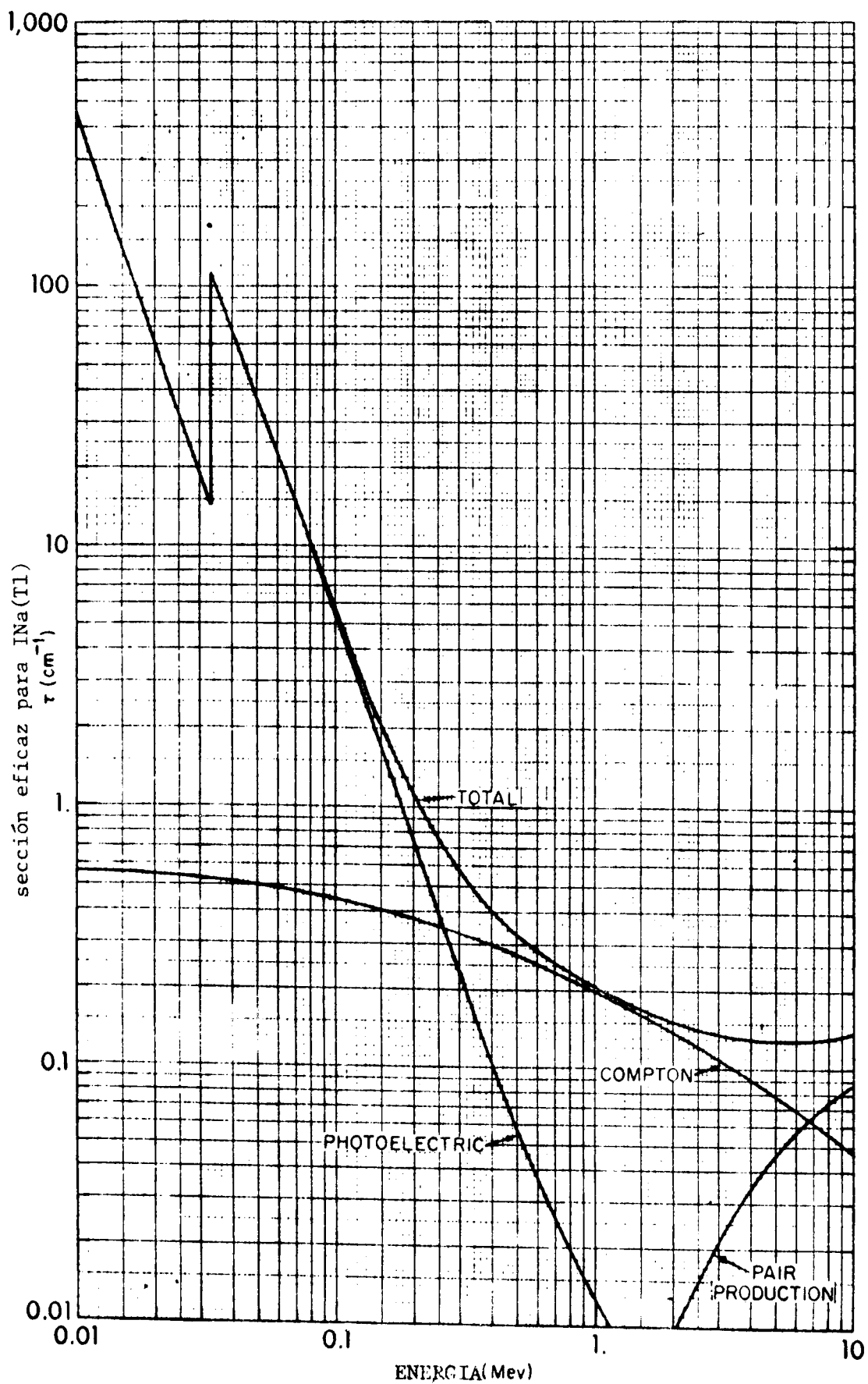


Figura 2