

Diferenças entre bibliotecas de seções de choque para dosimetria de nêutrons

T. C. Tardelli¹; L. C. Stecher¹; T. S. Coelho¹; V. A. De Castro¹; T. A. Cavalieri¹;
F. Menzel¹; R. S. Giarola¹; D. B. Domingos¹; H. Yoriyaz¹

¹Centro de Engenharia Nuclear, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, CEP 05508-000, São Paulo-SP, Brasil

tiago.tardelli@gmail.com;

(Recebido em 29 de março de 2013; aceito em 15 de julho de 2013)

Cálculos de dose absorvida dependem de um conjunto consistente de dados nucleares utilizados em simulações computacionais. Dados nucleares são armazenados em bibliotecas, entretanto, são raras as informações sobre as diferenças nos resultados de dose causadas por diferentes bibliotecas. Estas são processadas por um sistema computacional e para então poderem ser utilizadas por um código de transporte de radiação. Um dos sistemas capazes de processar dados nucleares é o sistema NJOY. O objetivo deste trabalho consiste em avaliar as bibliotecas de dados nucleares para nêutrons disponíveis em literatura, e quantificar as diferenças de dose absorvida obtidas utilizando-se as bibliotecas JENDL 4.0, JEFF 3.3.1 e ENDF/B.VII. O cálculo de dose absorvida foi realizado em modelos geométricos simples, como esferas e em modelo antropomórfico do corpo humano baseado na ICRP-110 através da simulação do transporte de nêutrons com o código MCNP5. Os resultados obtidos foram intercomparados com dados de literatura. Os resultados obtidos com as seções de choque das bibliotecas ENDF/B.VII e JEFF se mostraram idênticas na maioria dos casos, excetuando um caso onde a diferença foi superior a 10%. Já os resultados com a biblioteca JENDL mostraram se diferentes na maioria dos casos, sendo que, algumas diferenças superaram 200%. Observou-se que os valores de seções de choque de determinados núclídeos assumem valores bastante distintos em diferentes bibliotecas. Estas diferenças por sua vez causam diferenças consideráveis nos cálculos de dose.

Palavras-chave: Seções de choque, dados nucleares, Monte Carlo

Differences between cross-section libraries for neutron dosimetry.

Absorbed dose calculations depend on a consistent set of nuclear data used in simulations in computer codes. Nuclear data are stored in libraries, however, the information available about the differences in dose caused by different libraries are rare. The libraries are processed by a computer system to be able to be used by a radiation transport code. One of the systems capable of processing nuclear data is the NJOY system. The objective of this study is to evaluate the nuclear data libraries for neutrons available in the literature, and to quantify the differences in absorbed dose obtained using the libraries JENDL 4.0, JEFF 3.3.1 and ENDF/B.VII. The absorbed dose calculation was performed on a simple geometric model, as spheres, and in anthropomorphic model of the human body based on the ICRP-110 for neutron transport simulation using the MCNP5 code. The results were compared with literature data. The results obtained with cross sections from the libraries JEFF and ENDF/B.VII have shown to be identical in most cases, except for one case where the difference has exceeded 10%. The results obtained with JENDL library has shown to be considerably different in most cases comparing to other two libraries. Some differences were over 200%. The dose calculations showed differences between the libraries, which is justified by differences in the cross sections. It has been observed that the cross sections values of certain nuclides assume quite different values in different libraries. These differences in turn cause considerable differences in dose calculations.

Keywords: Cross sections, Nuclear Data, Monte Carlo

1. INTRODUÇÃO

Fatores de conversão fluência-dose são parâmetros básicos necessários para relacionar quantidades mensuráveis como fluência de nêutrons com dose absorvida no corpo humano. Geralmente estes fatores de conversão são obtidos por métodos numéricos através de códigos

computacionais, que simulam o transporte de nêutrons, em um modelo anatômico do objeto em estudo. Um destes métodos numéricos é o Método de Monte Carlo, que simula a interação da radiação com a matéria, sendo que, nesse processo é necessário fornecer dados nucleares, tais como, seções de choque de cada interação da radiação com o meio^{1,2}.

Uma vez que, a qualidade dos cálculos de dose absorvida depende dos dados nucleares utilizados, alguns trabalhos recentes na literatura têm abordado o problema de se obter um conjunto consistente de dados de seções de choque dos elementos químicos para uso em sistemas biológicos para terapia, radiobiologia e proteção radiológica.

Para que se possam utilizar esses elementos químicos em simulações computacionais é feita a construção de seus dados nucleares, tais como seções de choque (total, elástica, inelástica, entre outras), em arquivos que transcrevam suas reações físicas com a matéria. Cada elemento possui características próprias de interação com a matéria, cujas propriedades são descritas em bancos de dados nucleares e é importante que esses dados nucleares sejam bem estudados e organizados. Dados nucleares avaliados são armazenados e organizados em bibliotecas, mas são raras as informações sobre as diferenças nos resultados de dose causadas por estas diferentes bibliotecas.

As bibliotecas tais como, ENDF (Evaluated Nuclear Data File), não podem ser diretamente acessadas pelos códigos de transporte de radiação, mas precisam ser processadas por um sistema computacional e então caracterizadas, normalmente por dados pontuais ou em multigrupo, dependendo da aplicação e do código de transporte de radiação. Um dos sistemas utilizados para tal tarefa é o sistema NJOY³, desenvolvido no Laboratório de Los Alamos nos EUA.

Cálculos de dose absorvida para obtenção de grandezas de proteção radiológica geralmente são realizados com o uso de um modelo antropomórfico do corpo humano. Basicamente, existem dois tipos de modelos atualmente: modelos matemáticos e os modelos de voxels⁴. Mais recentemente, a ICRP publicou novos modelos antropomórficos baseados em voxels para determinação das quantidades dosimétricas de interesse⁵.

O objetivo deste trabalho consiste em avaliar as diversas bibliotecas de dados nucleares para nêutrons disponíveis em literatura. Esta avaliação consiste em quantificar as diferenças nos valores de dose absorvida causada pelas diferentes bibliotecas de dados nucleares utilizadas. O cálculo de dose absorvida é realizado em modelos geométricos simples como esferas e também em modelo antropomórfico do corpo humano, através da simulação do transporte de nêutrons com o código de Monte Carlo MCNP⁶.

Os resultados obtidos a partir de diferentes bibliotecas de seções de choque para nêutrons são intercomparados de forma relativa e com dados de literatura. São considerados os elementos biologicamente importantes, H, C, N, O, P e Ca,^{7,8} presentes no corpo humano e em equipamentos clínicos e materiais de blindagem da radiação. As bibliotecas de dados nucleares utilizados no presente trabalho são aqueles disponíveis no Centro de Engenharia Nuclear do IPEN que são: ENDF/B.VII⁹, JEFF-3.3.1⁹ e JENDL-4.0⁹.

2. MATERIAIS E MÉTODOS

O sistema ENDF/B (Evaluated Nuclear Data File) foi originalmente desenvolvido para fornecer um formato unificado para armazenar e recuperar conjuntos avaliados de seções de choque e permitir fácil troca de informações entre laboratórios. Os formatos de dados básicos descrevem seções de choque para as energias de nêutron incidente na faixa de 10^{-11} a 20 MeV.

Os conjuntos de dados nucleares são fornecidos por material que por sua vez pode ser definido como um isótopo, uma coleção de isótopos, um elemento natural contendo vários isótopos ou uma mistura de elementos. Um arquivo é subdividido em seções, cada um contendo dados específicos, tais como, reação total, espalhamento elástico, fissão e etc. No presente trabalho, são estudadas três bibliotecas em formato ENDF disponíveis no Centro de Engenharia Nuclear, que são: ENDF/B.VII⁹, JENDL-4.0⁹ e JEFF-3.1.1⁹.

2.1 Sistema NJOY

Uma biblioteca de dados nucleares possui uma série de informações sobre suas seções de choque. Essas informações estão contidas em arquivos que podem ser acessados no site <http://www-nds.iaea.org/>⁹. Neste site é possível encontrar diversas bibliotecas utilizadas em diversos tipos de pesquisa no mundo. No caso do presente estudo foram analisadas apenas as informações de nêutrons, mas há informações de elétrons, prótons, entre outras partículas.

Foram extraídos todos os arquivos referentes aos dados dos elementos que utilizamos referente ao nêutron. No total houve a extração de 39 bibliotecas do site, sendo apenas 13 elementos por biblioteca. Para processar esses dados foi utilizado o NJOY³ que preparou essas informações em um formato que o MCNP5 é capaz de acessar.

2.2 Código de Monte Carlo MCNP5

Um dos códigos mais utilizados para o transporte de nêutrons pela comunidade científica é o código MCNP5. Este código foi desenvolvido para propósito geral, e é capaz de simular sistemas em geometria 3-D, usando energia contínua. O código possibilita uma grande variedade de aplicações, incluindo blindagem da radiação, projeto de reatores nucleares, instrumentação nuclear e outros. Este código também tem sido utilizado especificamente para o transporte acoplado de nêutrons, fótons e elétrons, para resolver problemas relacionados com a dosimetria de nêutrons no campo da física médica e mais especificamente em terapia por captura de nêutrons.

2.3 Modelo antropomórfico

Por vários anos a estimativa de dose de radiação, tem sido determinada através do uso de descrições matemáticas do indivíduo referência, que representa uma população como um todo. Neste indivíduo referência, foram estabelecidas várias características como massa, dimensões dos órgãos, bem como as composições elementares dos tecidos e dos órgãos do corpo.

Recentemente, foram publicados pela ICRP os modelos baseados em voxels para o homem e mulher de referência. Estes modelos foram então utilizados para determinação das quantidades dosimétricas em radioproteção para trabalhadores e público em geral em casos de exposição à fontes internas e externas. Estes modelos são baseados em imagens médicas de pessoas reais consistentes com as informações dadas pela publicação 89 da ICRP¹⁰.

2.4 Modelo antropomórfico – ICRP-110

A publicação 110 feita pela ICRP apresenta 2 modelos antropomórficos construídos por voxels, denominados pela própria instituição como REGINA e REX, sendo respectivamente os modelos feminino e masculino, mas apenas o feminino é estudado neste trabalho. Em ambos os modelos, é apresentado diversas tabelas com as informações sobre matérias, densidades, dimensões, e demais características que auxiliam a reconstrução do mesmo para quaisquer estudos.

O modelo feminino descrito pela ICRP-110 (REGINA) possui altura de 1,63 m; e massa de 60 kg. Suas dimensões foram construídas com voxels de 4,84 mm de altura (eixo “z”), e 1,775 mm de arestas (eixos “x” e “y”), sendo essas colocadas respectivamente em 348 fatias (eixo “z”), 299 colunas (eixo “x”) e 137 linhas (eixo “y”), resultando em 14255124 voxels, nos quais apenas 3886020 voxels são de tecidos, sendo que, o restante é correspondente ao ar, seja interno ou externo ao corpo humano⁵.

Já o modelo masculino descrito pela ICRP-110 (REX), possui altura de 1,76 m; e massa de 73 kg. Suas dimensões foram construídas com voxels de 8,0 mm de altura (eixo “z”), e 2,137 mm de arestas (eixos “x” e “y”), sendo essas colocadas respectivamente em 222 fatias (eixo “z”), 254 colunas (eixo “x”) e 127 linhas (eixo “y”), resultando em 7161276 voxels, nos quais apenas 1946375 voxels são de tecidos⁵.

2.5 Simulações para cálculos de dose absorvida

Nas simulações para cálculo de dose absorvida que foram realizadas neste presente trabalho foram considerados fontes de nêutrons com energia na faixa desde 10^{-11} até 20 MeV, englobando assim uma ampla variedade de condições encontradas na prática. Esta faixa de energia compreende uma região em que existe maior confiabilidade nos dados de seções de choque contido nas bibliotecas de dados nucleares.

Ao analisarmos os documentos da ICRP-110 que apresentam as características dos modelos antropomórficos, percebemos que na descrição dos elementos contidos no arquivo, há mais do que os seis ditos anteriormente, são eles: ^{23}Na , ^{24}Mg , ^{32}S , ^{35}Cl , ^{39}K , ^{56}Fe , ^{127}I .

Neste trabalho foi feita uma análise mais detalhada em relação aos principais elementos do corpo humano, mas para mantermos a ideologia do trabalho decidiu-se gerar as bibliotecas de dados nucleares dos elementos menos abundantes no corpo humano para todas as bibliotecas citadas anteriormente. Os coeficientes de kerma e seções de choque obtidas diretamente das várias bibliotecas de dados nucleares para cada um dos elementos acima mencionados foram então comparados. Como o propósito do presente trabalho é analisar especificamente as discrepâncias causadas no cálculo de dose, por diferentes bibliotecas de dados nucleares foi escolhido primeiramente, um modelo geométrico simples, constituído de uma esfera de 10 cm de diâmetro irradiados por uma fonte neutrônica pontual isotrópica com energia de 20 MeV localizada a 2 cm da superfície da esfera localizada no vácuo. Utilizando o código Monte Carlo MCNP5 foram então calculadas as fluências diferenciais de nêutrons e deposições de energia alterando-se as bibliotecas.

Na segunda etapa do trabalho foi considerado um modelo antropomórfico feminino para estimativa de dose absorvida em diversos órgãos. As composições de cada tecido ou órgão do modelo antropomórfico foram consideradas de acordo com as informações da ICRP-110. Neste caso, também foram realizadas simulações com diferentes bibliotecas de dados nucleares para quantificar as discrepâncias na dose causadas por diferentes bases nucleares.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Com as bibliotecas prontas, foi construído um arquivo de dados de entrada para o código MCNP5 com geometria simples, descrito anteriormente. Os resultados de taxa de reação, fluxo e dose para o mesmo elemento utilizando-se as bibliotecas JENDL e ENDF/B.VII apresentaram diferenças consideráveis, o que indica que existem diferenças nas seções de choque, uma vez que são elas que determinam a probabilidade de interação da partícula com a matéria, influenciando diretamente nos valores de dose. As simulações com a biblioteca JEFF obtiveram resultados semelhantes aos resultados da biblioteca ENDF/B.VII, a proximidade dos valores se encontra dentro da margem de diferença de 1%. O único elemento que revelou resultados diferentes foi o Fósforo (P), que ao contrário dos outros casos, a biblioteca JEFF forneceu resultados iguais aos da JENDL. A diferença encontrada no caso do fósforo chegou a mais de 200% (analisando a taxa de reação (inelástica)). Por se tratarem de bibliotecas diferentes, a análise de suas seções de choque é imprescindível, uma vez que as diferenças entre as seções de choque levam as diferenças observadas nos valores de taxa de reação, fluxo, e dose.

3.1 Extração das informações

Para uma análise mais criteriosa das possíveis causas das diferenças observadas nos resultados, principalmente com relação à JENDL, foi feita uma análise sobre as seções de choque geradas, através de um programa criado em JAVA¹¹ e com o auxílio do MatLab¹².

3.2 Seção de Choque Total

A figura 1 apresenta a comparação da seção de choque total do Carbono de diferentes bibliotecas. Primeiramente foi feita uma análise rápida sobre a seção de choque total, para que então pudessemos partir para as seções de choque elásticas, inelásticas e seus subsequentes níveis. Ao se observar as curvas da figura 1 pode-se perceber que a princípio não há qualquer

diferença visível entre as bibliotecas que explique as diferenças nos resultados encontrados nas simulações com a esfera.

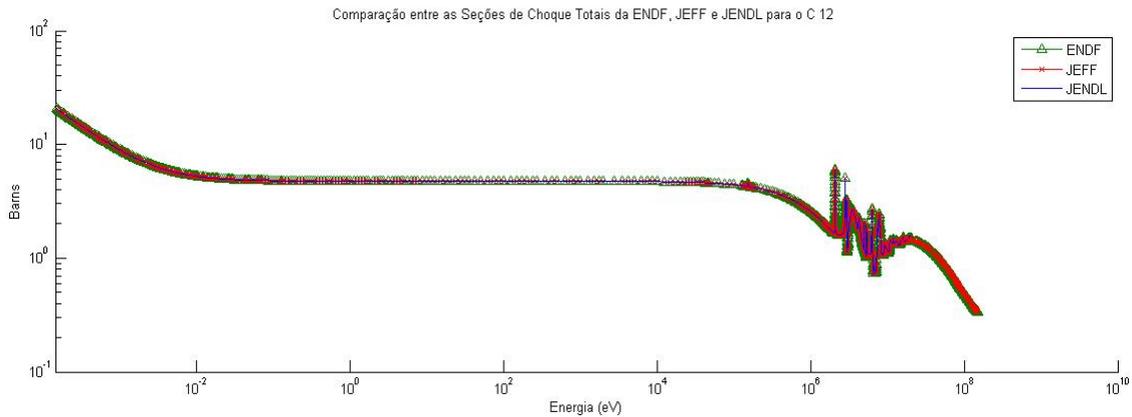


Figura 1: Comparação entre as seções de choque totais para o Carbono

A figura 2 apresenta a seção de choque do Fósforo, e mostra a comparação entre as curvas de seções de choque obtidas com diferentes bibliotecas. Ao contrário da anterior, é nítida a diferença que as bibliotecas JEFF e a JENDL apresentam em relação a ENDF/B,VII, porém são semelhantes entre si, o que fornece uma das indicações das causas das diferenças encontradas anteriormente nas simulações.

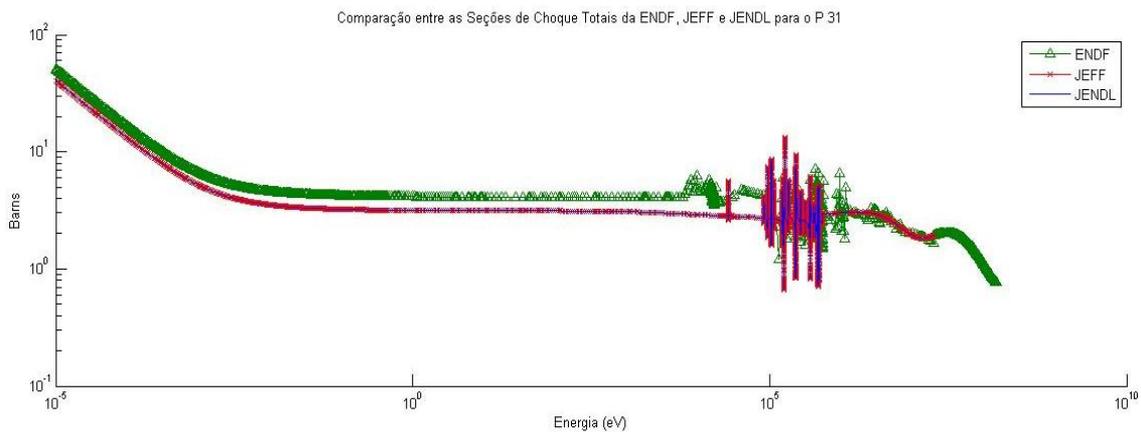


Figura 2: Comparação entre as Seções de choque totais para o Fósforo

Os demais elementos não apresentados aqui (Ca, H, N e O) obtiveram resultados semelhantes ao C, nos quais não há diferença visível entre suas bibliotecas. Desta forma, no prosseguimento para se verificar as causas das diferenças, analisamos cada componente da seção de choque total: seções de choque elástica e inelástica (inelástica total, e também cada nível inelástico).

3.3 Seção de Choque Elástica

A figura 3 apresenta as curvas das seções de choque elástica para o Carbono, e da mesma forma que a seção de choque total, não é possível observar discrepâncias que justifiquem as diferenças encontradas nas simulações. A figura 4 apresenta a comparação das seções de choque elásticas para o Fósforo, e como é possível observar, neste caso, a curva apresentada pela biblioteca JENDL apresenta uma grande diferença com relação a ENDF/B,VII, porém é idêntica a biblioteca JEFF, fato este encontrado na comparação das seções de choque totais.

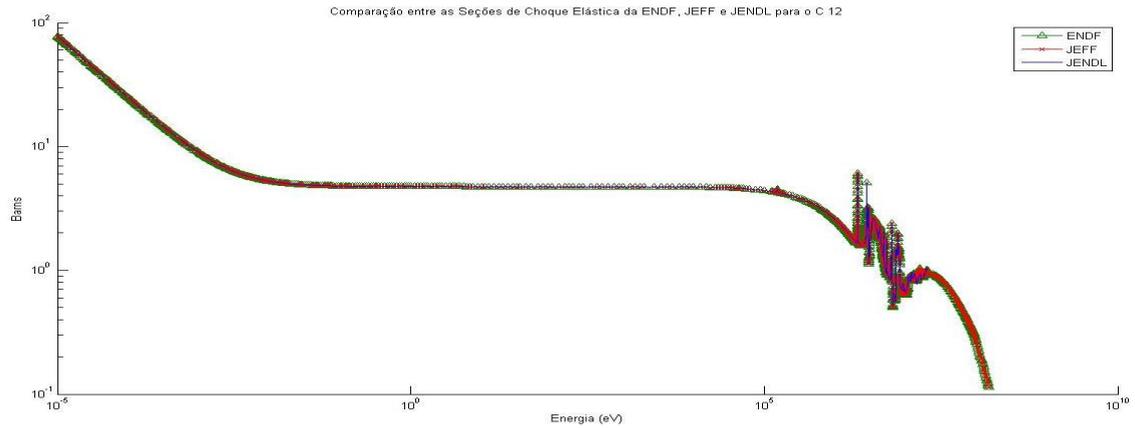


Figura 3: Comparação entre as Seções de choque Elásticas para o Carbono

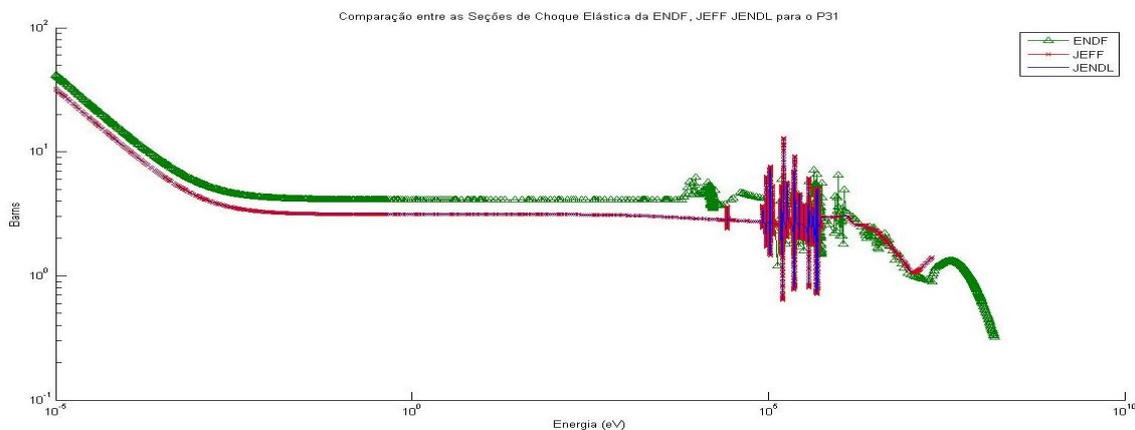


Figura 4: Comparação entre as Seções de choque Elásticas para o Fósforo

Os demais casos apresentaram a mesma característica que o Carbono, não apresentando diferenças significativas. Para se ter uma melhor análise das bibliotecas estudadas, foi necessário analisar as curvas de seção de choque inelástica que estão apresentadas a seguir.

3.4 Seção de Choque Inelástica

A figura 5 mostra a comparação das seções de choque inelásticas para o carbono. Diferentemente das outras curvas apresentadas, as seções de choque inelásticas possuem diferenças visíveis. A ENDF/B.VII e a JEFF se equivalem, porém a JENDL apresenta uma diferença significativa, o que justifica as diferenças encontradas nas simulações.

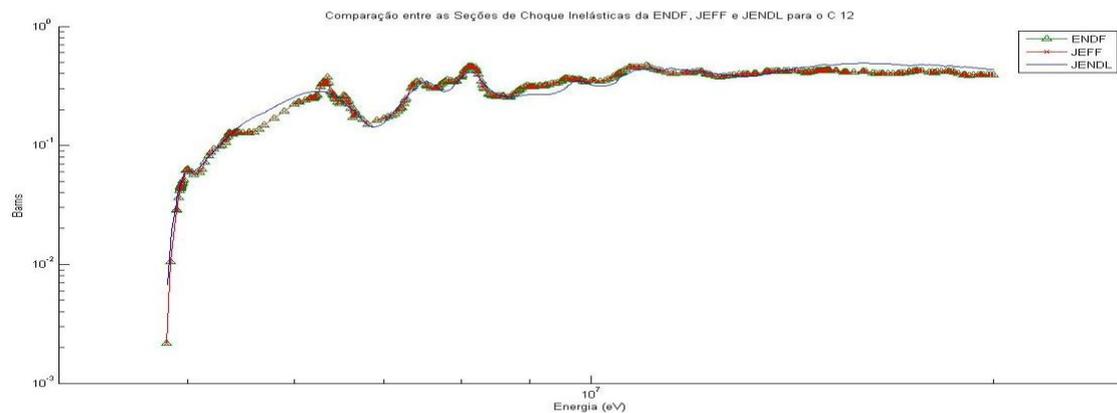


Figura 5: Comparação entre as Seções de Choque inelásticas para o Carbono

A figura 6 apresenta as curvas de seções de choque inelásticas para o Fósforo obtidas com as diferentes bibliotecas. Observam-se claramente diferenças significativas não apenas em relação aos valores, mas principalmente no comportamento dessas curvas. Nota-se que a seção de choque inelástica da biblioteca JENDL (neste caso a JEFF é igual a JENDL) é significativamente discrepante em relação a aquela fornecida pela biblioteca ENDF/B,VII, o que demonstra claramente a disparidade dos resultados de dose.

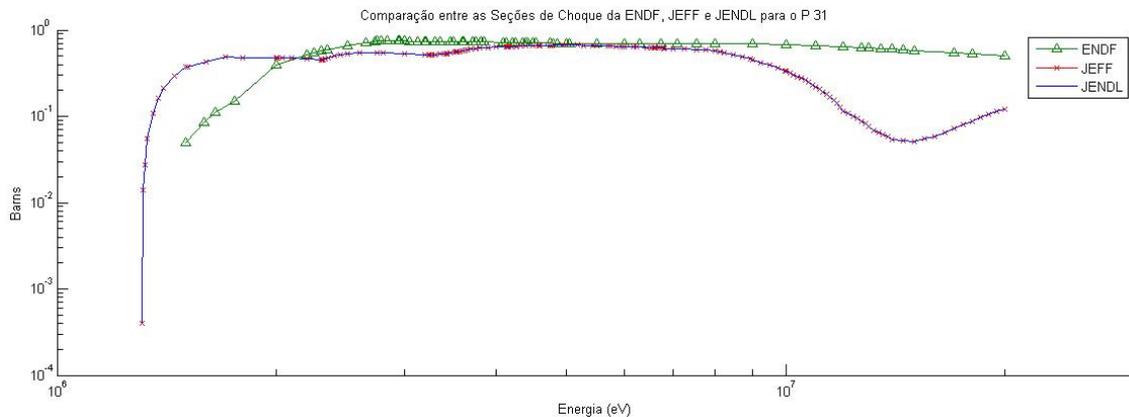


Figura 6: Comparação entre as Seções de Choque inelásticas para o Fósforo

Para todos demais núclídeos, as curvas de seções de choque inelástica fornecidas pela biblioteca JENDL apresentaram diferenças em relação a biblioteca ENDF/B,VII, sendo que, as curvas de seções de choque fornecidas pela JEFF comportaram-se de forma diferente apenas para o caso do P e neste caso, são equivalente aos da JENDL.

3.5 Seção de Choque Inelástica – Níveis Inelásticos

A seção de choque inelástica é a soma de todas as seções de choque de níveis inelásticos, e possui 40 níveis de estados excitados (n, n'), além de um último nível que é chamado de contínuo, onde se localizam todas as reações inelásticas que não se encaixam nos 40 níveis citados anteriormente. Entretanto, nem todos os elementos possuem reações inelásticas, e quando possuem, não necessariamente apresentam os 40 níveis e/ou o contínuo.

A tabela 1 mostra uma comparação dos níveis inelásticos apresentados pelas diferentes bibliotecas de seções de choque estudados. É importante ressaltar que os números que são apresentados na tabela significam o estado excitado máximo que o elemento em certa biblioteca apresenta. Como pode-se notar, uma das grandes causas para as diferenças de dose observadas nas simulações provem das diferenças nas seções de choque inelásticas fornecidas pelas diferentes bibliotecas. O simples fato de haver mais níveis inelásticos para o mesmo elemento é um fator que contribui para causar estas diferenças em cálculos dosimétricos para obtenção de grandezas de proteção radiológica envolvendo modelos antropomórficos.

Os motivos pelos quais essas bibliotecas apresentam essas diferenças podem ser diversos. Por exemplo, as bibliotecas escolhidas possuem origens diferentes, com dados de pesquisas diferentes, podendo então ter como resultado final bibliotecas com dados diferentes para o mesmo elemento. Além disso, as bibliotecas se baseiam em alguma referência para serem construídas, seja esta experimental ou teórica, mas normalmente é resultado do acoplamento entre as duas.

Os resultados deste trabalho mostram que as bibliotecas utilizadas em diferentes comunidades científicas podem apresentar diferenças grandes entre si, e que podem resultar em diferenças consideráveis no cálculo da dose. Para quantificar estas diferenças em cálculos de grandezas em proteção radiológica, foram realizadas simulações em modelo antropomórfico baseado em voxels e estão apresentados a seguir.

Tabela 1: Comparação dos níveis inelásticos de cada elemento fornecidos pelas diferentes bibliotecas de seções de choque

	ENDF		JEFF		JENDL	
	Estado Excitado	Contínuo	Estado Excitado	Contínuo	Estado Excitado	Contínuo
C	12	X	12	X	25	X
Ca	20	X	20	X	23	X
H	-	-	-	-	-	-
N	27	-	27	-	40	-
O	7	X	7	X	29	X
P	-	X	6	X	6	X

Números apresentados nas colunas do “Estado Excitado”: Nível Máximo inelástico atingido; X: possui espectro contínuo; -: não possui informações.

3.6 Construção dos modelos antropomórficos

A ICRP-110 descreve um modelo antropomórfico feminino e um masculino, nomeados de Regina e Rex, e a reconstrução desses modelos antropomórficos da ICRP-110 e subsequentemente simulações para cálculo de dose nesses modelos necessitam do auxílio de um programa chamado SCMS¹³ (Software para Construção de Manequins Segmentados), que lê os arquivos que contém todas as matrizes que descrevem os modelos, e em seguida cria um arquivo de entrada do MCNP5.

Foram inseridas informações de todos os órgãos condizentes com a ICRP-110, levando-se em conta os 13 elementos químicos para a composição dos tecidos do corpo humano, dentre eles os seis elementos mais importantes estudados com mais detalhes anteriormente. Foi feito dois arquivos de entrada para a fonte, um arquivo de entrada com uma fonte plana na posição posterior-anterior, e outro arquivo de entrada com uma fonte plana, mas na posição anterior-posterior, nomeados aqui de PA e AP.

Para cada arquivo de entrada foram feito mais 2 arquivos de entrada, resultando em 3 arquivos de entrada para possibilitar a verificação das três bibliotecas geradas. As energias de fonte de nêutrons simuladas abrange a faixa desde 10^{-9} MeV até 100 MeV, gerando um total de 47 arquivos de entrada. A relação total de casos simulados é: 1 arquivo de entrada para o modelos antropomórfico utilizado (REGINA), 2 para a fonte, 3 para bibliotecas, e 47 para a energia, resultando um total de 282 casos.

3.7 Cálculos de Dose absorvida

A ICRP-110 não divulgou seus resultados em formas de tabelas, e sim em gráficos, o que impossibilita a comparação direta com seus valores pontuais. Porém, a ICRP-110 se baseou na ICRP-74¹⁴ para a construção destes modelos, e comparou seus resultados com a ICRP-74, que possui a tabela para comparações de doses absorvidas.

Os gráficos que virão a seguir representam os valores de dose absorvida para o modelo antropomórfico da REGINA. Os órgãos analisados (baseado na ICRP-110) foram a Bexiga, medula óssea vermelha, Superfície do Osso Cortical, mamas, Cólon, Gônadas, Fígado, Pulmão, Esôfago, Restante, Pele, Estômago e Tireoide.

A figura 7 apresenta a curva de dose absorvida na bexiga devido a fonte de radiação na posição AP. A primeira observação possível de ser feita é que a ENDF/B.VII e a JEFF apresentaram resultados bastante próximos, sendo que as diferenças são pequenas da ordem de 0,5 %. A JENDL fornece resultados diferentes das demais, como já esperado, sendo que, as diferenças chegam da ordem de 100 %.

Considerando que a ICRP-74 é o nosso modelo de comparação de dose absorvida, podemos destacar que todas as bibliotecas obtiveram resultados diferentes da ICRP, algo já esperado, uma vez que se trata de modelos antropomórficos diferentes. É possível observar que as maiores

diferenças estão entre a JENDL e a ICRP-74, porém observa-se que para a faixa de energia acima de 0,1 MeV os valores obtidos com a JENDL se aproxima dos resultados da ICRP-74, voltando a apresentar resultados mais distantes da ICRP no final da faixa de energia estudada.

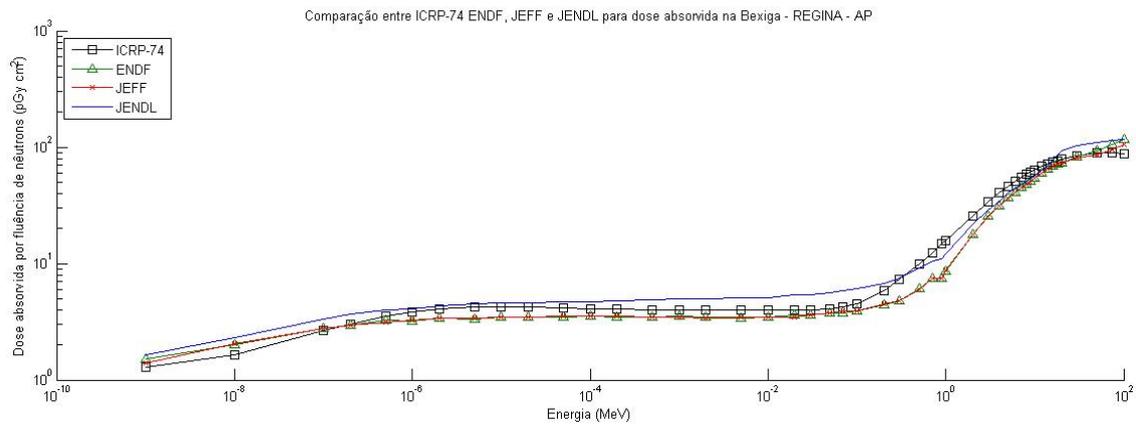


Figura 7: Comparação entre as Doses absorvidas para a Bexiga “– REGINA – AP

A figura 8 apresenta a dose absorvida na bexiga devido a fonte de radiação na posição PA. Um fator muito interessante neste gráfico, é que neste caso os resultados com a JENDL estão mais próximos aos obtidos com as bibliotecas ENDF/B.VII e JEFF, entretanto, tornam-se novamente discrepantes na faixa de energia entre 10^{-2} MeV e 1 MeV.

Com exceção da faixa de 10^{-9} MeV a 10^{-5} MeV, a ENDF/B,VII, JEFF e a JENDL obtiveram resultados bem próximos da ICRP-74. Essa semelhança é um resultado interessante, pois demonstra que mesmo com a biblioteca JENDL apresentando seções de choque inelásticas completamente diferentes, é possível extrair resultados bastante próximos. Esse comportamento é uma indicação de possíveis compensações causadas entre as várias diferenças de seções de choque envolvidas numa simulação, o que leva a necessidade de posteriores investigações mais detalhadas.

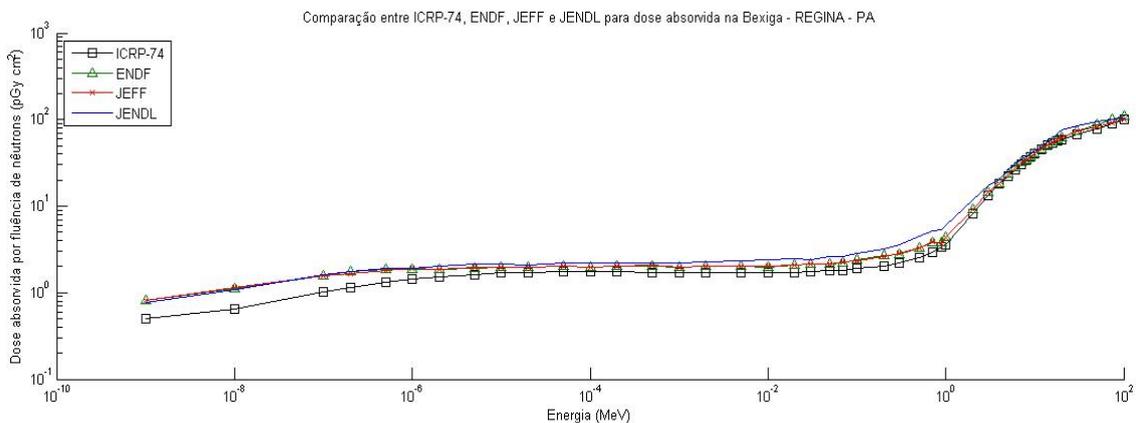


Figura 8: Comparação entre as Doses absorvidas para a Bexiga – REGINA – PA

A figura 9 apresenta a dose absorvida na medula óssea vermelha, na posição de fonte AP. Os resultados fornecidos com as bibliotecas ENDF/B,VII, JEFF, e JENDL foram muito semelhantes entre si, e muitos semelhantes aos da ICRP-74 exceto para a faixa de energia entre 10^{-9} MeV a 10^{-6} MeV.

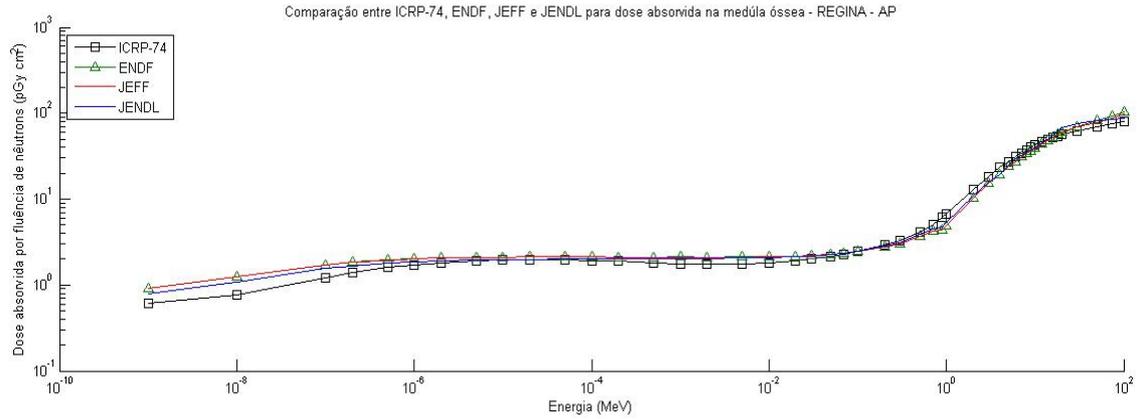


Figura 9: Comparação entre as Doses absorvidas para o medula óssea vermelha – REGINA – AP

A figura 10 mostra a comparação de doses absorvidas obtidas com as diversas bibliotecas para a Medula com a fonte, na posição PA. Os resultados fornecidos com as bibliotecas ENDF/B,VII e JEFF são muito próximos. Os resultados apresentados com a JENDL embora, no geral, próximos aos apresentados pelas outras bibliotecas, apresenta diferenças importantes, principalmente na região de 10^{-4} MeV até 1 MeV. A ICRP-74 para este alvo e nesta posição de fonte apresenta uma curva muito próxima no início daquela fornecida com ENDF/B.VII e a JEFF até 10^{-6} MeV. Nesta faixa de energia os resultados entre ENDF/B,VII, JEFF e ICRP-74 também são bastante próximos até a faixa de 10^{-2} MeV, a partir do qual se distanciam da ICRP-74. Como foi visto na primeira parte deste trabalho, as seções de choque fornecidas pela JENDL possuem comportamento bastante distinto das seções de choque de outras bibliotecas, o que explica as diferenças de estimativa de dose observadas.

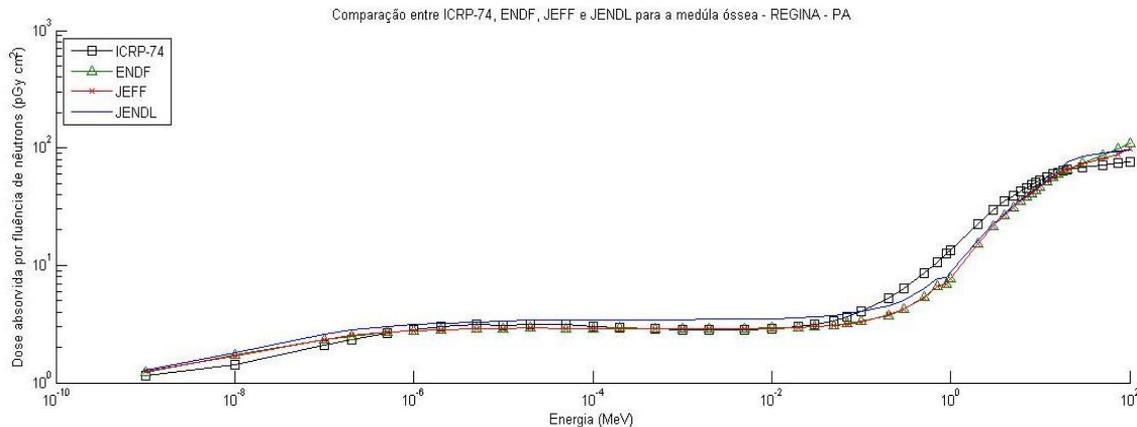


Figura 10: Comparação entre as Doses absorvidas para a medula óssea vermelha – REGINA – PA

A figura 11 apresenta a comparação entre as doses absorvidas para as Gônadas femininas (ovários) com a fonte na posição AP. É possível observar que os valores da ICRP-74 estão acima dos resultados das simulações utilizando as bibliotecas ENDF/B.VII, JEFF e JENDL. Estes valores superiores podem ser explicados pela diferença no posicionamento dos órgãos nos modelos antropomórficos. O efeito do posicionamento é minimizado para altas energias o que pode ser verificado na diminuição das diferenças com a energia dos nêutrons de fonte. A partir da região de 10 MeV há uma aproximação dos resultados de todas as bibliotecas, isso se justifica pelo fato de que quanto mais energético o nêutron é, maior sua penetração no tecido, minimizando o efeito de localização.

É possível perceber também que os resultados utilizando a biblioteca JENDL foram menos discrepantes em comparação aos resultados utilizando as bibliotecas ENDF e JEFF. Como foi visto, a biblioteca JENDL possui seções de choque inelásticas diferentes das demais, e este fato leva a diferenças de doses. Para o presente caso, os resultados indicam que as reações inelásticas foram menos influentes nos resultados de dose absorvida.

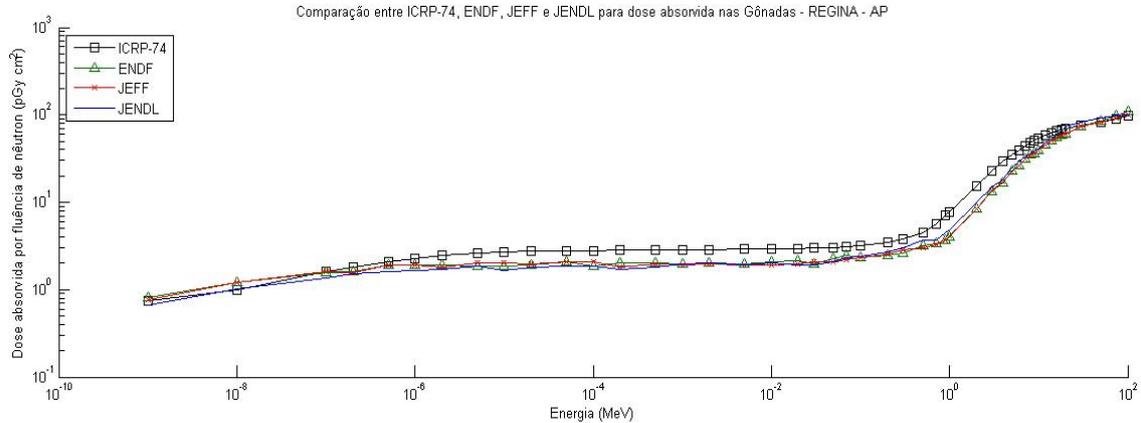


Figura 11: Comparação entre as Doses absorvidas para as Gônadas – REGINA – AP

A figura 12 apresenta a comparação das doses absorvidas nas Gônadas com a fonte na posição PA. Para a posição AP os gráficos da ENDF/B,VII, JEFF e JENDL ficaram abaixo do valor da ICRP-74, porém para esta posição os valores ficaram acima.

A ENDF/B,VII, JEFF e a JENDL ficaram próximas até a energia de 10^{-4} MeV, onde a JENDL se distanciou mais ainda da ICRP, e retorna a ter valores semelhantes próximo a energia de 1 MeV. É interessante o fato de que na posição AP, as doses ficaram um pouco abaixo da ICRP-74, e na posição PA, as doses ficaram acima. A posição do órgão/tecido/região de interesse é um fator muito importante, e como já foi dito, estamos comparando modelos antropomórficos diferentes. Essas diferenças podem ir, da composição, da proporção de cada elemento em sua composição, dimensão, e posicionamento. Caso um órgão esteja um pouco a frente, ou atrás em relação a ICRP-74, haverá diferenças parecidas com as apresentadas nas Gônadas.

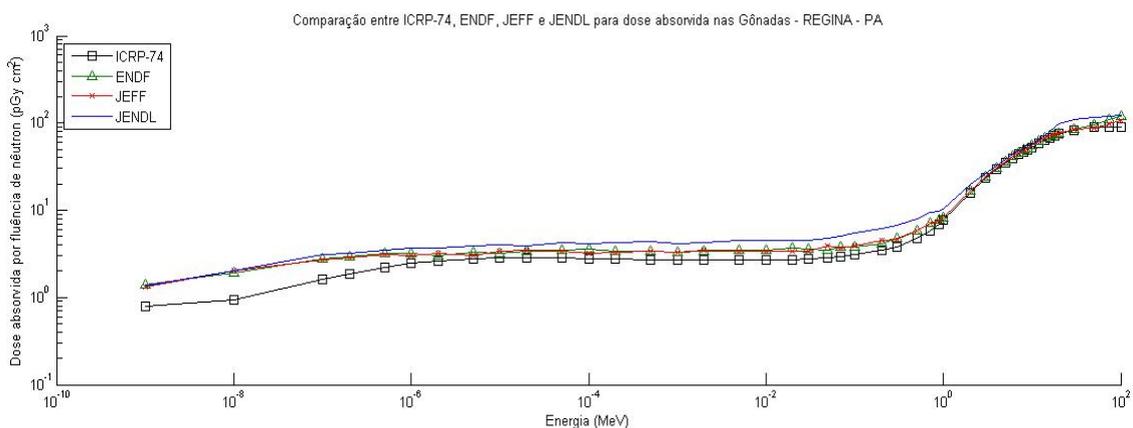


Figura 12: Comparação entre as Doses absorvidas para as Gônadas – REGINA – PA

A figura 13 apresenta a comparação entre as doses absorvidas para a tireoide com a fonte na posição AP. Os resultados na faixa de energia entre 0,1 MeV até 10 MeV possuem maiores diferenças nos valores de doses absorvidas fornecidas pela ICRP-74 em relação as obtidas no presente trabalho, chegando a um fator de 10, na região de 1 MeV. Possíveis justificativas para

tal diferença é o posicionamento do órgão e/ou sua composição. A JENDL forneceu resultados muito próximos às demais bibliotecas.

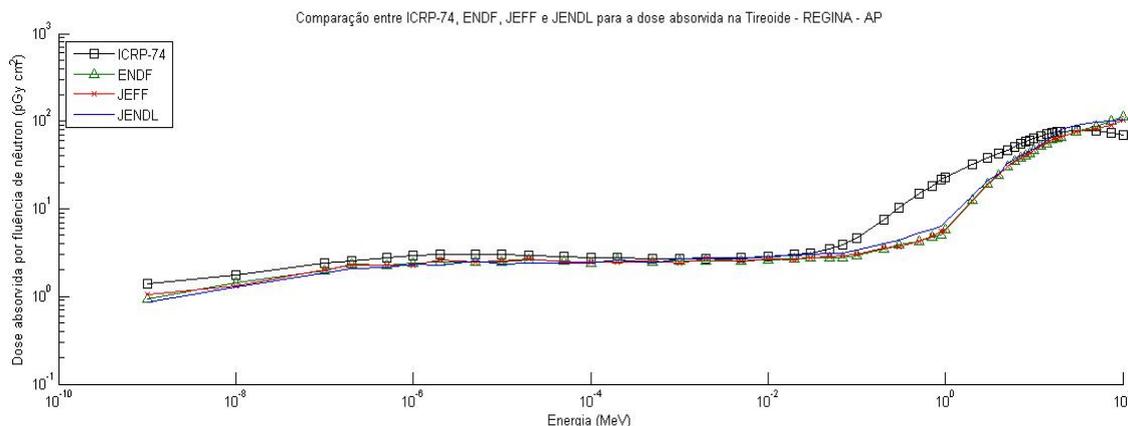


Figura 13: Comparação entre as Doses absorvidas para a Tireoide – REGINA – AP

A figura 14 apresenta a comparação entre as doses absorvidas para a tireoide com a fonte na posição PA. Como visto na figura 13, as diferenças nesta figura também são consideráveis.

A biblioteca JENDL forneceu resultados de doses absorvidas semelhantes as da ENDF/B.VII e JEFF, tendo apenas uma maior diferença na região de 1 MeV. A ICRP-74 possui valores de dose em média seis vezes menor que as bibliotecas desse estudo. Este fato solidifica a ideia de que o posicionamento da tireoide está de alguma forma relacionado com essas diferenças.

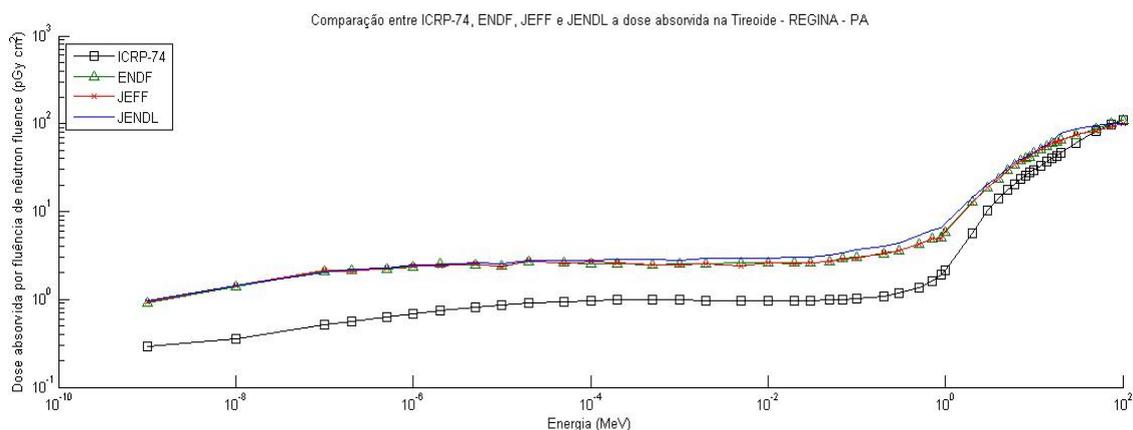


Figura 14: Comparação entre as Doses absorvidas para a Tireoide – REGINA – PA

4. CONCLUSÃO

A base de dados nucleares é fundamental para qualquer simulação computacional envolvendo o transporte de radiação num meio qualquer. Entretanto, como analisado no presente trabalho, diferentes bibliotecas de seções de choque apresentam diferentes valores para o mesmo elemento químico. Neste sentido, é importante quantificar as diferenças nas grandezas estimadas devido ao uso de diferentes bibliotecas de seções de choque. Particularmente, em estimativas de grandezas radiológicas como dose absorvida e dose equivalente devido a fonte de nêutrons é fundamental que se faça uma análise criteriosa das diferenças provocadas na estimativa de dose obtidas com diferentes bases de dados nucleares.

O estudo das três bibliotecas de seções de choque analisadas no presente trabalho demonstrou que para determinados elementos químicos, as bibliotecas apresentam diferentes dados de seções de choque entre si, principalmente a JENDL 4.0. Estas diferenças nos valores de seções de choque provocam diferenças consideráveis nas estimativas de grandezas radiológicas como observados no presente trabalho. Foi demonstrado também que as seções de choque que

apresentam maiores discrepâncias são as seções de choque inelásticas, que mesmo não sendo a interação mais provável, causa uma grande diferença nos resultados de estimativa de dose.

Conclui-se que a simples mudança de uma biblioteca de dados nucleares de um determinado elemento químico, pode causar diferenças importantes em cálculos de dose. Salienta-se também que a construção das bibliotecas necessita de uma análise rígida em relação aos seus dados, uma vez que para uma comparação fidedigna, é necessária uma relação completa de seus dados.

5. AGRADECIMENTOS

Os autores gostariam de agradecer a Comissão Nacional de Energia Nuclear-CNEN pelo apoio financeiro.

-
1. Alghamdi A A, Ma A, Tzortzis M and Spyrou N M 2005 Neutron fluence-to-dose conversion coefficients in an anthropomorphic phantom *Radiat. Prot. Dosim.* 115, 606-611.
 2. Bozkurt A, Chao T C and Xu X G 2001 Fluence-to-dose conversion coefficients based on the VIP-MAN anatomical model and MCNP5 code for monoenergetic neutrons above 20 MeV *Health Phys.* 81, 184-202.
 3. MacFarlane R E The NJOY nuclear data processing system, version 91 1994 Technical Report No. LA-12740-M, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos.
 4. Yoriyaz H., Stabin M. G., Santos A. "Monte Carlo MCNP5-4B-Based Absorbed Dose Distribution Estimates for Patient - Specific Dosimetry." *J. Nucl. Med.*, 42, 662-669, (2001).
 5. International Commission on Radiological Protection. ICRP Publication 110: Adult Reference Computational Phantoms, *Annals of the ICRP Volume 39 Issue 2*, 2009.
 6. OAK RIDGE NATIONAL LABORATORY. "MCNP5-I Monte Carlo N-Particle Transport Code System", RICC Compute Code Collection, Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico, 2000.
 7. Chadwick M B et al. 1999 A consistent set of neutron kerma coefficients from thermal to 150 MeV for biologically important materials *Med. Phys.* 26, 974-991.
 8. Meulders J P, Benck S and Slypen I 2000 Experimental kerma coefficients of biologically important materials at neutron energies below 75 MeV *Med. Phys.* 27, 2541-59.
 9. www-nds.iaea.org. Acessado durante primeiro semestre de 2011
 10. ICRP Publication 89: Basic Anatomical and Physiological Data for Use in Radiological Protection: Reference Values, 2003.
 11. http://www.java.com/pt_BR/
 12. MATLAB 6.1, The MathWorks Inc., Natick, Ma, US, 2000
 13. Yoriyaz, H. Desenvolvimento de uma metodologia computacional para cálculo em dosimetria interna. Tese de Doutorado – IPEN – Junho de 2000.
 14. International Commission on Radiological Protection. ICRP. Conversion Coefficients for Use in Radiological Protection against External Radiation. ICRP Publication 74. *Ann of ICRP*, 26 (3/4). Elsevier Science Ltd, Oxford (1996b).