

Produção, Utilização e Detecção de Raios-X

A. F. Barbosa

Centro Brasileiro de Pesquisas Física - CBPF/CNPq
Rua Dr. Xavier Sigaud, 150
22290-180 - Rio de Janeiro, RJ - Brasil
E-mail: laudo@cat.cbpf.br

RESUMO

No ano em que se comemora o centenário da descoberta dos raios-x, apresentamos uma abordagem de temas relacionados à produção, utilização e detecção desta radiação. O formalismo do Eletromagnetismo Clássico é tomado como suporte para a descrição dos fenômenos tratados, com especial enfoque para a emissão de radiação por partículas carregadas e para o espalhamento de raios-x por elétrons. Detetores de raios-x a gás são descritos, destacando sua evolução desde a contagem de fótons até a aquisição de imagens.

Palavras-chaves: Raios-X, Síncrotron, Espalhamento, Detetores.

ÍNDICE

I - Fundamentos Físicos

- 1.1 Radiação Eletromagnética
- 1.2 Radiação Emitida por Cargas Aceleradas
- 1.3 Eletrodinâmica Quântica

II - Espalhamento de Raios-X

- 2.1 Espalhamento por um Átomo
- 2.2 Espalhamento por um Cristal

III - Utilização de Raios-X

IV - Detetores de Raios-X

- 4.1 Detetores a Gás
- 4.2 Detetores a Gás Sensíveis a Uma Dimensão
- 4.3 Detetores a Gás Sensíveis a Duas Dimensões
- 4.4 Processamento de Sinais

REFERÊNCIAS

I - Fundamentos Físicos

A existência dos raios-x foi evidenciada por W. C. Röntgen. Este estudava os efeitos de raios catódicos, que eram produzidos entre eletrodos submetidos a diferença de potencial elétrico em um tubo de vidro evacuado. Tendo coberto o tubo com papel escuro, observou que uma tela de platinocianeto de bário colocada a certa distância do tubo fluorescia desde que os raios catódicos fossem acionados. Röntgen deduziu que alguma radiação invisível atravessava o papel escuro e provocava a fluorescência na tela. A descoberta desta radiação foi comunicada em um encontro da *Würzburg Physico-Medical Society* em Dezembro de 1895, tendo-lhe sido atribuído o nome de raios-x. Em 1896, Röntgen e outros colaboradores apresentaram o primeiro tubo gerador de raios-x.

Cabe ressaltar que os raios-x foram também gerados anteriormente por outros pesquisadores que se interessavam pelos raios catódicos. Em particular, W. Crookes já havia observado que placas fotográficas eram impressionadas quando colocadas perto de tubos de raios catódicos [1].

1.1 Radiação Eletromagnética

A observação detalhada de fenômenos eletromagnéticos levou ao estabelecimento das conhecidas equações de Maxwell, relacionando os campos elétrico (**E**), magnético (**B**) e suas respectivas fontes ρ e **j**:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{E} &= \frac{4\pi\rho}{\epsilon_0} \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \\ \nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= 0\end{aligned}$$

c e ϵ_0 são as constantes referentes à velocidade da luz e à permissividade elétrica no vácuo. Na forma acima expressa, estas equações exprimem as relações eletrodinâmicas entre os campos **E** e **B** no vácuo. Seu estudo é objeto dos cursos e livros textos de eletromagnetismo clássico familiares aos estudantes de graduação em Física. Ressaltaremos aqui que os campos **E** e **B** que satisfazem estas equações apresentam comportamento ondulatório. De fato, na ausência de fontes, podemos escrever:

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{B} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}\end{aligned}$$

A fim de obter equações para **E** e **B** separadamente, tomamos o rotacional de seus termos:

$$\nabla_{\mathbf{x}}\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{E}}{\partial t}$$

$$\nabla_{\mathbf{x}}\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{B}}{\partial t}$$

Utilizando a identidade vetorial

$$\nabla_{\mathbf{x}}\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{F} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{F}) - \nabla^2\mathbf{F}$$

e fato de que, na ausência de fontes, $\nabla \cdot \mathbf{E} = \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$, encontramos as seguintes seguintes equações:

$$\nabla^2\mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2\mathbf{E}}{\partial t^2} = 0$$

$$\nabla^2\mathbf{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2\mathbf{B}}{\partial t^2} = 0$$

Estas últimas descrevem ondas planas se propagando com velocidade c . A análise de suas soluções [2,3] mostra os campos \mathbf{E} e \mathbf{B} são ortogonais e transportam energia expressa pelo vetor

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} \mathbf{E} \times \mathbf{B}$$

O vetor \mathbf{S} , conhecido como ‘vetor de Poynting’, descreve genericamente o fluxo de energia eletromagnética (por unidade de tempo por unidade de área) através de um volume espacial.

Esta abordagem teórica, juntamente com a evidência de que a luz visível também manifesta comportamento ondulatório e se propaga no vácuo transportando energia, permitiu uma associação direta entre os conceitos de luz e radiação eletromagnética. Neste contexto, os raios-x são compreendidos como radiação de comprimento de onda não visível. Efetivamente, tanto os raios-x quanto a luz visível se propagam em ‘linha reta’, impressionam placas fotográficas, além de não serem perturbados em suas trajetórias por campos elétricos ou magnéticos. Uma demonstração definitiva foi feita por Laue, em 1912, que previu teoricamente e verificou experimentalmente que os raios-x são difratados por cristais.

1.2 Radiação Emitida por Cargas Aceleradas

Além de prever que a radiação eletromagnética se comporta como onda, as equações de Maxwell indicam também que uma carga elétrica acelerada emite radiação de natureza eletromagnética. A solução para o caso de uma carga pontual se movendo segundo uma trajetória $\mathbf{r}(t)$ é [4]:

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \left[\frac{(\mathbf{n} - \boldsymbol{\beta})}{(1 - \mathbf{n}\boldsymbol{\beta})^3 R^2 \gamma^2} \right] + \frac{1}{c} \left[\frac{\mathbf{n}}{(1 - \mathbf{n}\boldsymbol{\beta})^3 R} \times \left[(\mathbf{n} - \boldsymbol{\beta}) \times \frac{d\boldsymbol{\beta}}{dt} \right] \right] \right\}_{RET}$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{c} (\mathbf{n} \times \mathbf{E})$$

onde:

$$\boldsymbol{\beta} = \frac{\mathbf{v}}{c} = \frac{1}{c} \frac{d\mathbf{x}}{dt}, \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \boldsymbol{\beta}^2}}$$

R é a distância entre a carga e a posição \mathbf{x} correspondente ao observador (Ver Fig. 01) . As expressões acima descrevem portanto os campos elétrico e magnético percebidos por um observador, devidos ao movimento de uma carga elétrica pontual. O subscrito 'RET' indica que o termo entre chaves deve ser avaliado em $t' = t - R/c$. Note-se que para velocidades não-relativísticas a expressão para o campo elétrico reproduz o resultado para o caso eletrostático.

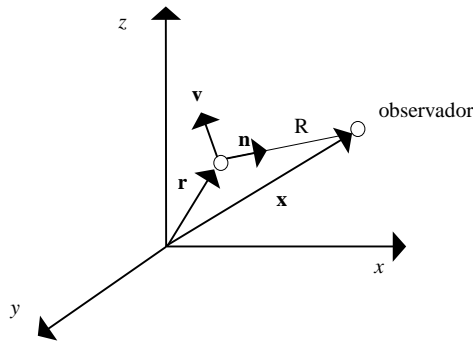


Fig. 01: Posições relativas para carga pontual e observador

Podemos então estimar o fluxo de energia irradiada pela carga sobre o observador, integrando o vetor de Poynting sobre uma esfera de raio R em torno da carga. O produto $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ incluirá um termo em R^{-4} e outro em R^{-2} . Este último provém do segundo termo da expressão para \mathbf{E} , e será independente de R quando integrado sobre o volume da esfera ($dV \approx R^2 dR$). O termo restante será arbitrariamente pequeno para R suficientemente grande. A contribuição importante vem portanto do termo contendo a aceleração da carga pontual, $d\boldsymbol{\beta}/dt$. Daí a conclusão de que cargas aceleradas emitem radiação.

Sob esta perspectiva, a radiação observada em tubos de raios catódicos pode ser explicada como efeito da desaceleração súbita dos eletrons quando estes se chocam contra um alvo - conhecida como *bremsstrahlung*. Nesse caso, os vetores \mathbf{v} e $d\boldsymbol{\beta}/dt$ são paralelos. Pode-se mostrar [2] que quando \mathbf{v} e $d\boldsymbol{\beta}/dt$ são perpendiculares (movimento circular ou curvo), a energia irradiada se concentra na direção tangente à trajetória. Este é o princípio explorado pelos geradores de radiação síncrotron, onde um feixe de

elétrons é curvado por campos magnéticos, emitindo radiação tanto mais colimada quanto maior forem a velocidade dos elétrons no feixe e a magnitude do campo de curvatura.

1.3 Eletrodinâmica Quântica

Embora o formalismo da eletrodinâmica clássica seja suficiente para a descrição precisa de fenômenos associados à luz, há casos em que este formalismo não se aplica. Entre estes casos podemos mencionar o efeito foto-elétrico e a observação de linhas características nos espectros de emissão de radiação em tubos.

O efeito foto-elétrico consiste basicamente na extração de elétrons de um material pela incidência de luz. A princípio supôs-se que um elétron fosse extraído desde que a fonte luminosa lhe transferisse energia suficiente. Admitindo-se a teoria da eletrodinâmica clássica é possível computar o intervalo de tempo necessário para que a energia irradiada sobre um elétron seja bastante para extraí-lo. Segundo este cálculo, o intervalo de tempo pode ser de magnitude facilmente mensurável em experimentos praticáveis. Entretanto, as emissões foto-elétricas observadas pareciam instantâneas [5]. Por outro lado, foi também observado que as emissões só ocorrem quando a luz utilizada tem comprimento de onda inferior a um certo limite que depende do material iluminado.

No espectro de emissão de radiação por tubos nota-se que, a uma componente contínua - esperável pela descrição clássica - vem-se sobrepor uma linha aguda, característica de cada material usado como alvo (anodo). Além disto, a distribuição em comprimentos de onda dos espectros de radiação emitida não se estende de zero a infinito, mas apresenta um limite inferior (Ver Fig. 02).

Estes fenômenos só puderam ser satisfatoriamente explicados a partir da hipótese de Planck, enunciada em 1905, segundo a qual as trocas de energia entre radiação e matéria se fazem por meio de pacotes de energia. Baseado nesta proposição, A. Einstein explicou o efeito foto-elétrico sugerindo que a radiação eletromagnética apresenta um caráter corpuscular: cada 'grão' de luz, ou fóton, tem energia $E = h\nu$, onde ν corresponde à frequência da luz considerada ($\nu = c/\lambda$) e h é uma constante universal. O sucesso da hipótese marcou o início da mecânica quântica, que trouxe um novo formalismo para a descrição de fenômenos microscópicos.

Os fenômenos eletromagnéticos são atualmente explicados pela chamada teoria eletrodinâmica quântica. O grau de concordância dos resultados desta teoria com os resultados experimentais é surpreendente [6]. Seu modelo matemático supõe uma certa dualidade para a radiação eletromagnética e para todas as partículas fundamentais: o comportamento de cada partícula quântica e suas interações com outras partículas é regido por uma amplitude de probabilidade complexa, tendo esta última um caráter ondulatório. Diversas experiências comprovaram aspectos marcantes desta dualidade [1, 5]: difração de elétrons, de nêutrons e mesmo de átomos de hidrogênio.

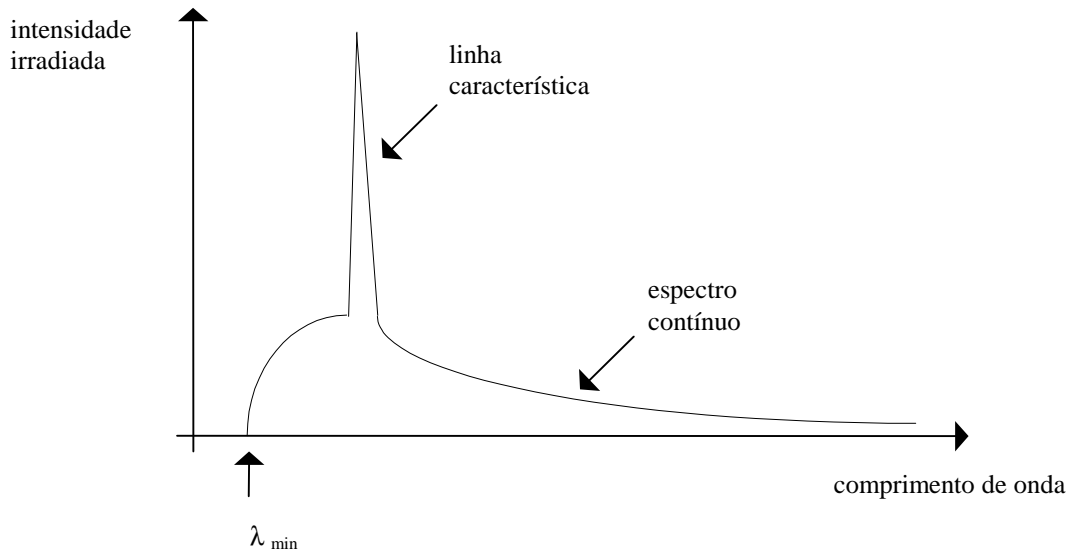


Fig. 02: Comportamento qualitativo do espectro de emissão de radiação por tubos

II - Espalhamento de Raios-X

Pela descrição clássica, um elétron livre ao qual se faz incidir luz oscila segundo o campo eletromagnético. Conforme visto na secção I.2, a aceleração deste movimento oscilatório provocará emissão de radiação, cuja componente relevante do campo elétrico é dada por:

$$\mathbf{E}_a = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 c} \left[\frac{\mathbf{n}}{(1 - \mathbf{n}\boldsymbol{\beta})^3 R} \times \left[(\mathbf{n} - \boldsymbol{\beta}) \times \frac{d\boldsymbol{\beta}}{dt} \right] \right]_{\text{RET}}$$

Para o caso de movimento não relativístico, esta componente se reduz a :

$$\mathbf{E}_a = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 c} \left[\frac{\mathbf{n}}{R} \times \left(\mathbf{n} \times \frac{d\boldsymbol{\beta}}{dt} \right) \right]_{\text{RET}}$$

A potência total irradiada é estimada por integração do vetor de Poynting:

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} \mathbf{E}_a \times \mathbf{B} = \frac{1}{4\pi} |\mathbf{E}_a|^2 \mathbf{n}, \text{ pois } \mathbf{B} = \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{E}_a}{c}$$

Daqui pode-se estimar a intensidade de radiação emitida pelo elétron livre, para o caso de onda incidente monocromática polarizada em um único plano, por unidade de ângulo sólido [3]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{e}{mc^2} \right)^2 \sin^2 \Theta$$

Onde Θ é o ângulo entre a direção de espalhamento e a direção de oscilação do elétron. Esta fórmula expressa a fração de energia irradiada relativamente à energia incidente sobre o elétron. Uma expressão para o caso de onda incidente não polarizada é obtida tomando-se a média sobre todos os ângulos de polarização:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2} \left(\frac{e}{mc^2} \right)^2 (1 + \cos^2 2\theta)$$

Esta é a chamada fórmula de Thomson para o espalhamento de radiação por um elétron livre (V. Fig. 03). Este espalhamento é dito coerente, já que a onda espalhada tem a mesma frequência da onda incidente. Substituição dos valores numéricos para e , m e c indica que a fração considerada é da ordem de 10^{-25} , sendo máxima na direção do feixe de luz incidente. Vale lembrar que a fórmula de Thomson perde precisão à medida em que a energia dos fótons da radiação incidente se torna comparável à energia de repouso do elétron livre (\approx MeV). Para estes casos o formalismo quântico deve ser aplicado [2,3]. Entretanto, o resultado clássico é satisfatório para o espalhamento de raios-x, cuja energia de fótons é da ordem de KeV.

O aspecto importante a ser destacado para as aplicações do espalhamento de raios-x é que, embora a fração de energia espalhada seja extremamente pequena, cada elétron componente de um material funciona como re-emissor da radiação incidente. Como o comprimento de onda dos raios-x é da ordem das distâncias interatômicas, a radiação espalhada pode ocasionar o aparecimento de máximos de interferência. O padrão de interferência é uma fonte de informações a respeito da estrutura da matéria.

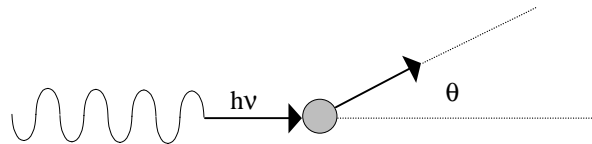


Fig. 03: Representação esquemática do espalhamento de radiação por um elétron.

2.1 Espalhamento por um Átomo

A fim de estimar a intensidade de radiação coerente espalhada por um átomo, suponhamos que os elétrons estejam distribuídos em torno do núcleo segundo uma função de densidade eletrônica $\rho(\mathbf{r})$, de modo que a carga elétrica por unidade de volume seja dada por:

$$\frac{dq}{dV} = e\rho(\mathbf{r})$$

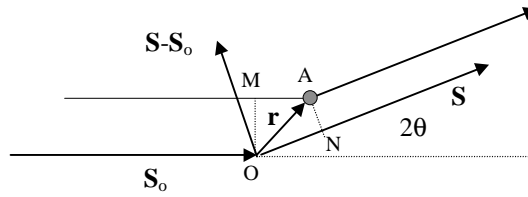


Fig. 04: Diferença de caminho ótico para as ondas espalhadas por um elétron na origem e outro na posição \mathbf{r} .

O fator de espalhamento - f - de um átomo é definido como a intensidade espalhada pelo mesmo, relativamente ao espalhamento de um único elétron. É um fator que depende da geometria do átomo. Para uma onda incidente na direção do vetor unitário \mathbf{S}_0 , o espalhamento numa direção \mathbf{S} devido à contribuição de um elemento de carga na posição \mathbf{r} apresentará uma certa amplitude e uma certa fase, esta última devida à diferença de caminho ótico desde a fonte até o observador (Ver Fig. 04). O fator de espalhamento para esta contribuição é portanto descrito como uma função complexa do tipo:

$$df = Ae^{i\varphi}$$

onde A e φ são respectivamente a amplitude e a fase da radiação espalhada. Segundo a definição de f , a amplitude para df é simplesmente a relação entre o espalhamento do elemento de volume dV e o espalhamento de um elétron. Esta relação é supostamente igual à relação entre as cargas do elemento de volume e do elétron, ou seja: $A = dq/e$. Quanto à fase, note-se que uma diferença de caminho ótico equivalente a um comprimento de onda resultaria em uma diferença de fase de 2π . Uma diferença de caminho ótico qualquer, Δ , corresponde portanto à diferença de fase φ :

$$\varphi = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta$$

Por outro lado, de acordo com a geometria esboçada na Fig. 04, a diferença de caminho ótico é dada por:

$$\Delta = ON - MA = \mathbf{r} \cdot \mathbf{S} - \mathbf{r} \cdot \mathbf{S}_0 = (\mathbf{S} - \mathbf{S}_0) \cdot \mathbf{r}$$

Podemos então escrever:

$$\varphi = 2\pi \mathbf{s} \cdot \mathbf{r}$$

$$\text{com: } \mathbf{s} = \frac{\mathbf{S} - \mathbf{S}_0}{\lambda}$$

O vetor \mathbf{s} é chamado de vetor recíproco, por apresentar relação de reciprocidade com as distâncias interatômicas, conforme veremos na próxima seção. Seu valor absoluto é dado por:

$$|\mathbf{s}| = \frac{2 \operatorname{sen} \theta}{\lambda}$$

Nestes termos, o fator de espalhamento para um átomo se escreve:

$$f(\mathbf{s}) = \int_{V_{\text{atomo}}} \rho(\mathbf{r}) e^{2\pi i \mathbf{r} \cdot \mathbf{s}} dV$$

Note-se que $f(\mathbf{s})$ é máximo na direção do feixe incidente: $f(0) = Z$, onde Z é o número de elétrons do átomo. Ou seja, na direção do feixe incidente o espalhamento de um átomo é a soma do espalhamento de todos seus elétrons.

2.2 Espalhamento por um Cristal

Num cristal, os átomos ou grupos de átomos se distribuem de forma regular sobre uma rede de pontos periodicamente distribuídos sobre as três direções. Podemos portanto considerar inicialmente o espalhamento por cada ponto da rede, atribuindo em seguida o fator de espalhamento de cada átomo ou grupo de átomos aos pontos correspondentes. Consideremos então que uma onda espalhada na direção \mathbf{S} por um ponto na origem do sistema de coordenadas seja descrita por:

$$A_{\mathbf{r}=0} = A_0 e^{i\omega t}$$

Relativamente a esta, a onda espalhada por um outro ponto p_j da rede numa posição \mathbf{r}_j , apresentará, segundo a análise da seção anterior, uma diferença de fase:

$$A_j = A_0 e^{i(\omega t + 2\pi \mathbf{s} \cdot \mathbf{r}_j)}$$

O espalhamento devido a todos os pontos da rede, A , é a soma destas componentes:

$$A = \sum_{j=1}^N A_0 e^{i(\omega t + 2\pi \mathbf{s} \cdot \mathbf{r}_j)}$$

Onde N é o número total de pontos da rede. Como os pontos são regularmente distribuídos no espaço, podemos re-escrever a expressão acima em termos das componentes do vetor \mathbf{r}_j em cada direção.

$$\mathbf{r}_j = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$$

Onde \mathbf{a} , \mathbf{b} e \mathbf{c} são vetores unitários definindo a base da rede de pontos. u , v e w são números inteiros. Se $N = N_1 \times N_2 \times N_3$ é o número total de pontos da rede, teremos:

$$A = A_o e^{i\omega t} \sum_{u=0}^{N_1-1} e^{2\pi i u \mathbf{a} \cdot \mathbf{s}} \sum_{v=0}^{N_2-1} e^{2\pi i v \mathbf{b} \cdot \mathbf{s}} \sum_{w=0}^{N_3-1} e^{2\pi i w \mathbf{c} \cdot \mathbf{s}}$$

Trabalhando algebricamente esta última expressão encontramos:

$$A = A_o e^{i\omega t} \left(\frac{e^{2\pi i N_1 \mathbf{a} \cdot \mathbf{s}} - 1}{e^{2\pi i \mathbf{a} \cdot \mathbf{s}} - 1} \right) \left(\frac{e^{2\pi i N_2 \mathbf{b} \cdot \mathbf{s}} - 1}{e^{2\pi i \mathbf{b} \cdot \mathbf{s}} - 1} \right) \left(\frac{e^{2\pi i N_3 \mathbf{c} \cdot \mathbf{s}} - 1}{e^{2\pi i \mathbf{c} \cdot \mathbf{s}} - 1} \right)$$

A intensidade $I(\mathbf{s})$ de radiação espalhada na direção \mathbf{S} é proporcional ao módulo desta amplitude ao quadrado:

$$I(\mathbf{s}) = A \cdot A^* = A_o^2 \left(\frac{\text{sen}^2 N_1 \phi_1}{\text{sen}^2 \phi_1} \right) \left(\frac{\text{sen}^2 N_2 \phi_2}{\text{sen}^2 \phi_2} \right) \left(\frac{\text{sen}^2 N_3 \phi_3}{\text{sen}^2 \phi_3} \right)$$

onde

$$\phi_1 = \frac{1}{2} (2\pi \mathbf{a} \cdot \mathbf{s})$$

$$\phi_2 = \frac{1}{2} (2\pi \mathbf{b} \cdot \mathbf{s})$$

$$\phi_3 = \frac{1}{2} (2\pi \mathbf{c} \cdot \mathbf{s})$$

Na expressão para $I(\mathbf{s})$, cada um dos termos entre parêntesis apresenta máximos acentuados para valores de $\phi_i = n\pi$, e zeros para $\phi_i = (n + m/N_i)\pi$, com n e m inteiros.

$$I_i(\mathbf{s}) = N_i \quad \text{para} \quad \phi_i = n\pi,$$

Resulta que $I(\mathbf{s})$ só tem valor apreciável quando as seguintes condições são verificadas:

$$\phi_1 = \frac{1}{2} (2\pi \mathbf{a} \cdot \mathbf{s}) = h\pi$$

$$\phi_2 = \frac{1}{2} (2\pi \mathbf{b} \cdot \mathbf{s}) = k\pi$$

$$\phi_3 = \frac{1}{2} (2\pi \mathbf{c} \cdot \mathbf{s}) = l\pi$$

Estas últimas são as chamadas “condições de Laue”, que se reduzem à conhecida Lei de Bragg para condição de máximos de interferência

$$2d_{hkl} \sin \theta = \lambda$$

Os índices (h,k,l) definem famílias de planos paralelos. d_{hkl} é a distância entre planos adjacentes pertencentes à família (h,k,l). Lembrando agora a definição do vetor \mathbf{s} e seu valor absoluto, fica clara a relação de reciprocidade entre ele e a rede de pontos:

$$|\mathbf{s}| = \frac{1}{d_{hkl}}$$

Para os inteiros (h,k,l) que verificam as condições de Laue, o espalhamento da rede de pontos é $I_{hkl} = A_0^2 N^2$.

Para o espalhamento por um cristal, podemos agora supor que em cada ponto \mathbf{r}_j da rede há um grupo de n átomos, situados nas posições:

$$\mathbf{r}_j + \mathbf{R}_1, \mathbf{r}_j + \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{r}_j + \mathbf{R}_n.$$

De acordo com a análise precedente e com o resultado obtido para o espalhamento por um átomo, a amplitude espalhada correspondente a este grupo é:

$$A_j = A_e e^{i\omega t} \left\{ f_1 e^{2\pi i(\mathbf{r}_j + \mathbf{R}_1) \cdot \mathbf{s}} + \dots + f_n e^{2\pi i(\mathbf{r}_j + \mathbf{R}_n) \cdot \mathbf{s}} \right\}$$

$$\therefore A_j = A_e e^{i\omega t} \sum_{\nu} f_{\nu} e^{2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{R}_{\nu}} e^{2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{r}_j}$$

O espalhamento pelo cristal é dado pela soma de todos os termos A_j :

$$A = A_e e^{i\omega t} \sum_j e^{2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{r}_j} \sum_{\nu} f_{\nu} e^{2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{R}_{\nu}}$$

Os termos relevantes nesta soma são aqueles em que \mathbf{r}_j obedece a condição de Laue, de modo que a soma acima se reduz a:

$$A = N A_e e^{i\omega t} F_{hkl}$$

$$F_{hkl} = \sum_{\nu} f_{\nu} e^{2\pi i \mathbf{r}_{hkl} \cdot \mathbf{R}_{\nu}}$$

Este resultado descreve de que maneira a estrutura presente em cada ponto da rede cristalina determina a amplitude de espalhamento observada. O termo F_{hkl} é denominado fator de estrutura. A intensidade do espalhamento é:

$$I(\mathbf{s}) = A \cdot A^* = N^2 A_e^2 \sum_{\nu} \sum_{\eta} f_{\nu} f_{\eta} e^{2\pi i \mathbf{r}_{hkl} \cdot (\mathbf{R}_{\nu} - \mathbf{R}_{\eta})}$$

Donde se conclui que a intensidade de espalhamento observada é função das distâncias entre os átomos, e não de suas posições na rede cristalina. É também importante notar que $I(\mathbf{s})$ é uma função que permite em princípio a reconstituição da distribuição geométrica dos átomos de um cristal. A reconstituição seria relativamente simples se fosse possível se medir, além da intensidade, a diferença de fase entre as ondas espalhadas. O desconhecimento das fases torna complexos os métodos de estudo da estrutura fina de cristais pela técnica de espalhamento de raios-x

III - Utilização de Raios-x

Na seção precedente foi enfatizado o fato de que os raios-x, como radiação eletromagnética, interage com as partículas constituintes da matéria e desta interação resulta um espectro de espalhamento que é função da disposição geométrica destas partículas. A estrutura ordenada dos cristais propicia o aparecimento de máximos de intensidade bem definidos nos espectros. As direções em que aparecem os máximos indicam, pela condição de Laue, a distância entre os planos cristalinos correspondentes. Esta é uma das aplicações mais usuais da difração de raios-x. O tamanho dos cristais também se reflete na forma da curva de espalhamento ($I(\mathbf{s}) \approx \text{sen}^2 N\phi / \text{sen}^2 \phi$), o que é explorado no estudo de tamanho de grãos em policristais.

Note-se que a difração por cristais ocorre porque o comprimento de onda dos raios-x é comparável às distâncias interatômicas. Por esta mesma razão os fótons de raios-x são mais energéticos ($E = h\nu = hc/\lambda$), e portanto mais penetrantes, que a luz visível. Esta característica é bastante explorada, por exemplo em aplicações médicas, para se observar a imagem projetada de objetos opacos à luz visível. Nestas aplicações se mede essencialmente o mapa de absorção de raios-x pelos objetos. Recentemente foi desenvolvido o processo de tomografia computadorizada [7], que permite a reconstituição da imagem de seções internas de objetos a partir de medidas do coeficiente de absorção sobre a seção considerada. Este processo é de grande interesse em pesquisa, na indústria e na medicina, pois torna possível a observação do interior de objetos sem destruí-los.

Por outro lado, o efeito foto-elétrico pôs em evidência as chamadas ‘bordas de absorção’ características de cada material. À medida em que aumenta a energia de um fóton, aumenta a probabilidade de que ele atravesse uma certa espessura de material, ou seja, diminui o coeficiente de absorção. Mas quando a energia atinge o valor da energia de ligação de elétrons nos átomos, o fóton é absorvido e o re-equilíbrio eletrônico do átomo pode originar emissão de um fóton ou elétron menos energéticos. Para essa energia, o espectro de absorção apresentará um salto abrupto. Este fenômeno é explorado em diversas espectroscopias. Uma das mais recentes é a técnica EXAFS (*Extended X-Ray Absorption Fine Structure*), em que é analisado o comportamento da curva de absorção próximo da borda característica para se obter informações sobre a estrutura fina dos átomos.

O espalhamento de raios-x por gases, líquidos e sólidos amorfos também pode ser abordado de modo semelhante ao acima exposto. Para estes a intensidade de espalhamento não apresenta máximos pronunciados em certas direções, como no caso

dos cristais, mas a partir dela é possível estimar por exemplo a distância média entre átomos, moléculas e seus vizinhos mais próximos [8].

Algumas hipóteses foram implicitamente assumidas na formulação do espalhamento de raios-x por um cristal. Foi admitido por exemplo que, uma onda espalhada por um átomo do cristal não é novamente espalhada por outro átomo. Foi também negligenciada a absorção pelo cristal. Estas hipóteses se satisfazem geralmente para os casos de cristais pequenos. Por outro lado, não foi considerado o espalhamento pelo núcleo dos átomos. Este porém é irrelevante em comparação com o espalhamento por elétrons [9].

IV - Detetores de Raios-X

Na faixa de energia dos raios-x, a interação mais provável entre fótons e matéria é o efeito foto-elétrico. Outras interações como o espalhamento inelástico (efeito Compton) e a produção de pares elétron-pósitron prevalecem para fótons mais energéticos - da ordem MeV. Portanto, o efeito foto-elétrico é o principal fenômeno físico explorado em detetores de raios-x. O resultado imediato desta interação é a liberação de um foto-elétron, cuja energia corresponde à diferença entre a energia do fóton absorvido e a energia de ligação do elétron no átomo de onde foi extraído.

Um átomo que perde um foto-elétron fica em estado excitado, e tende a rearranjar a distribuição de elétrons a seu redor de modo a recuperar um estado estável. O rearranjo pode resultar em emissão de fótons de baixa energia (fluorescência) ou mesmo de outro elétron (Auger elétron). A sensibilização de filmes fotográficos é uma das consequências das interações entre fóton e matéria, que foi utilizada utilizada como uma das primeiras técnicas de detecção. Durante os anos 80 foi desenvolvido um filme, hoje chamado *Image Plate*, que supera em diversos aspectos o desempenho dos filmes tradicionais [10]. Nos *Image Plates*, cada foton absorvido deixa um átomo em estado meta-estável. Por incidência de luz visível os sítios excitados se re-estabilizam emitindo fótons de luz ultravioleta. Estes últimos são coletados por outros detetores, geralmente tubos foto-multiplicadores, a partir dos quais a imagem estocada no filme é reconstituída. Um *Image Plate* pode ser utilizado milhares de vezes sem perda apreciável de desempenho.

Os tubos foto-multiplicadores são apropriados para a detecção de fótons de baixa energia. Para a detecção de fótons de raios-x eles são intermediados por cristais cintiladores, que absorvem os raios-x e emitem luz visível ou ultravioleta.

Nos detetores ditos 'a semicondutor', a energia do fóton absorvido ocasiona a criação de pares elétron-buraco que, captados por um eletrodo, constituem um sinal elétrico analisável. Entretanto, a pequena amplitude de sinal e a sensibilidade dos dispositivos semicondutores à temperatura implicam usualmente no uso de eletrônica de baixo ruído e na refrigeração dos detetores. O interesse destes sistemas é portanto mais aproveitável em aplicações envolvendo fótons de mais alta energia (raios-x 'duros' e raios gama). O desenvolvimento dos diodos PIN tornou mais acessível o uso de

semicondutores na detecção de raios-x. Entre as camadas p e n , os diodos PIN apresentam uma região ‘compensada’, onde as concentrações de impurezas tipo p e tipo n são equivalentes. Esta região simula um semiconductor puro ou intrínseco. Em virtude de sua sua robustez e de suas pequenas dimensões físicas, os diodos são componentes de baixo custo e fácil refrigeração, servindo de base para a construção de detetores comercialmente competitivos [11].

Vários tipos de detetores têm sido desenvolvidos para diferentes aplicações dos raios-x. Não se pode argumentar de forma genérica que um tipo particular seja preferível aos outros, já que cada aplicação supõe características especiais e nenhum tipo de detetor apresenta um conjunto de características que atenda a todos os casos. Por outro lado, a disponibilidade de fontes de radiação cada vez mais intensas, com qualidades como colimação e polarização (radiação de síncrotron), tem aberto horizontes insuspeitados para inúmeras aplicações. Vários desafios são portanto atualmente colocados no campo de desenvolvimento de detetores, boa parte dos quais espera soluções.

A seguir apresentamos uma breve descrição dos detetores a gás, que permitirá uma compreensão mais detalhada da fenomenologia intrínseca aos detetores. Aspectos importantes do funcionamento de outros tipos de detetores poderão ser vislumbrados a partir desta descrição. Os detetores a gás foram historicamente dos mais utilizados, e continuam sendo desenvolvidos por responderem satisfatoriamente a diversos requisitos considerados conflitantes em muitas aplicações.

4.1 Detetores a Gás

A capacidade de ionizar gases foi um aspecto dos raios-x identificado desde os tempos de sua descoberta. Num detetor a gás a idéia básica é coletar em eletrodos a carga elétrica liberada por ionização após a passagem dos fótons por um meio gasoso (Ver Fig. 05). Se E_f é a energia do fóton e E_i a energia média requerida por ionização, um número médio de E_f/E_i pares elétron-íon são liberados por fóton absorvido. Estes pares tendem a se neutralizar e se recombinar com as moléculas do próprio gás. Para a detecção efetiva do fóton faz-se necessário o estabelecimento de uma diferença de potencial elétrico, V_o , de modo que os pares sejam separados e coletados em eletrodos. Um detetor em que V_o é suficiente para coletar toda a carga elétrica liberada por um fóton é chamado Câmara de Ionização. Seu uso principal consiste em monitorar a intensidade de um feixe incidente a partir da medida da corrente gerada por ionização.

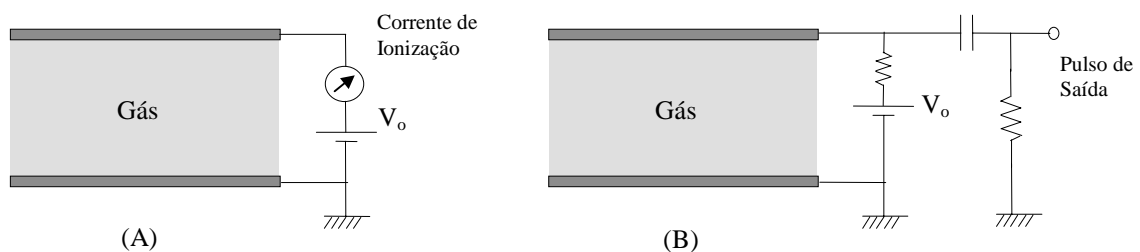


Fig. 05: Circuito esquemático de detetores a gás em modo de câmara de ionização (A) e de contador proporcional (B).

O campo elétrico estabelecido pela diferença de potencial V_0 transmite energia aos elétrons e íons liberados. Dada sua menor massa, os elétrons se precipitam mais rapidamente que os íons em direção a seu eletrodo correspondente. A partir de um certo valor de V_0 a energia transmitida aos elétrons passa a ser bastante para que estes ocasionem novas ionizações em choques contra as moléculas do gás. Os novos elétrons assim ligeirados são também acelerados pelo campo elétrico e geram outras ionizações. Este processo em cascata é chamado de ‘avalanche’. Representa uma amplificação da carga de ionização que torna praticável a medida do pulso elétrico gerado por cada fóton absorvido. Detetores que operam baseados no fenômeno de avalanche e nos quais a carga liberada por avalanche é proporcional à energia do fóton são conhecidos como Contadores Proporcionais.

Valores extremos de V_0 resultam numa perda da proporcionalidade entre energia do fóton e carga elétrica coletada, até o nível em que qualquer fóton absorvido origina a mesma quantidade de pares elétron-íon. Este é o caso dos Contadores Geiger-Muller. Fig. 06 ilustra as regiões de operação dos detetores a gás em função de V_0 . Além da região Geiger-Muller o campo elétrico gera ionizações espontâneas, ou ‘descargas’, do gás.

Os diferentes modos de operação dos detetores a gás são responsáveis pela flexibilidade de adaptação dos mesmos a diversas aplicações. Para os estudos de estrutura da matéria, pode-se notar a partir do exposto na seção 2 que é necessário o levantamento de uma curva de intensidade de espalhamento que varia no espaço ao redor da amostra. O uso de filmes permite a estimativa do espalhamento em duas dimensões e tem sido intensamente usado para este fim. Mostramos a seguir como os detetores a gás se desenvolveram até incorporar a capacidade para registrar imagens de espalhamento em condições não abordáveis pelas técnicas de detecção por filmes.

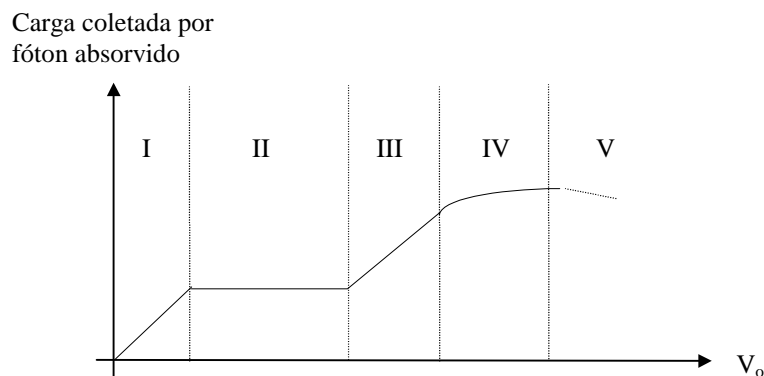


Fig. 06: Modos de operação dos detetores a gás segundo a diferença de potencial aplicada entre eletrodos: (I) predominância de recombinação, (II) câmara de ionização, (III) contador proporcional, (IV) contador Geiger-Muller, (V) descargas.

4.2 Detetor a Gás Sensíveis a Uma Dimensão.

No final dos anos 60 foi proposto um novo tipo de detetor a gás, no qual a posição de incidência do fóton era estimada a partir de uma medida de tempo [12]. Um fio resistivo foi usado como eletrodo captador de elétrons. Nas extremidades do fio foram dispostos capacitores, de modo que, para cada fóton detectado, a constante de tempo RC para carregar os capacitores depende da posição sobre o fio onde foi absorvido o fóton (Ver Fig. 07).

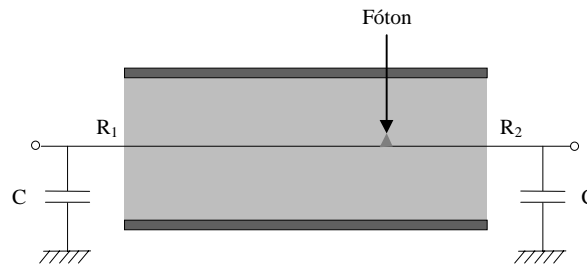


Fig. 07: Esquema para decodificação da posição de um fóton a partir do tempo de carregamento de capacitores.

A idéia de se converter a medida de posição em medida de tempo foi estendida pela introdução do uso de linhas de retardo [13]. Neste caso a posição de incidência do fóton é diretamente associada ao tempo de propagação do pulso elétrico através da linha de retardo.

Alguns aspectos importantes que permitiram a concepção de detetores a gás sensíveis a posição merecem ser destacados. Um destes é o uso de fios como eletrodos. De fato, numa geometria envolvendo fios (\approx cabos co-axiais), o campo elétrico apresenta dependência radial em torno do fio. A intensidade de campo elétrico é máxima na superfície do fio, decaindo segundo o inverso da distância radial. Em consequência, apenas na região próxima à superfície do fio o campo atinge intensidade suficiente para provocar o fenômeno de avalanche, resultando numa quantidade de carga elétrica espacialmente localizada.

Nos detetores que usam linhas de retardo, a carga de avalanche não é diretamente explorada. Apenas a carga induzida pela avalanche em outros eletrodos é amostrada e direcionada à linha (Ver Fig. 08).

A fim de estimar a carga induzida por avalanche, notamos que esta pode ser considerada como uma carga pontual localizada na superfície do fio. Netas condições, a carga induzida numa superfície S é dada por:

$$\sigma(x, y) = -\epsilon\epsilon_0 \left[\frac{\partial V_q}{\partial z} \right]_S$$

Onde ϵ é a constante dielétrica do gás e V_q é o potencial elétrico devido à carga de avalanche:

$$V_q(x, y, z) = \frac{q}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z - 2nb)^2}}$$

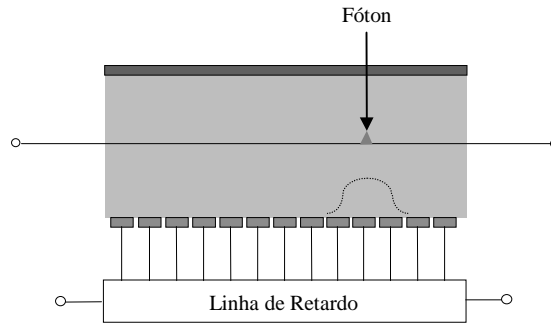


Fig. 08: Esquema para decodificação da posição de um fóton a partir do tempo de transmissão de sinais por linha de retardo.

A expressão acima é obtida considerando-se infinitas cargas imagens da carga de avalanche simetricamente disposta entre dois planos condutores, conforme a geometria efetivamente utilizada em detectores a gás. A carga de avalanche, q , é tipicamente da ordem de 10^5 elétrons. A partir dos 5 primeiros termos o somatório atinge um comportamento assintótico, de modo que, para fins de uma estimativa, não é necessário considerar infinitos termos.

Fig. 09 representa a forma da distribuição de carga induzida para o caso de uma separação $b = 3\text{mm}$ entre o fio anodo e o plano catodo (gás: argônio; pressão: 1 Atm). A partir desta é possível determinar a dimensão dos catodos mostrados na Fig. 08, de modo que a carga induzida por avalanche seja corretamente amostrada.

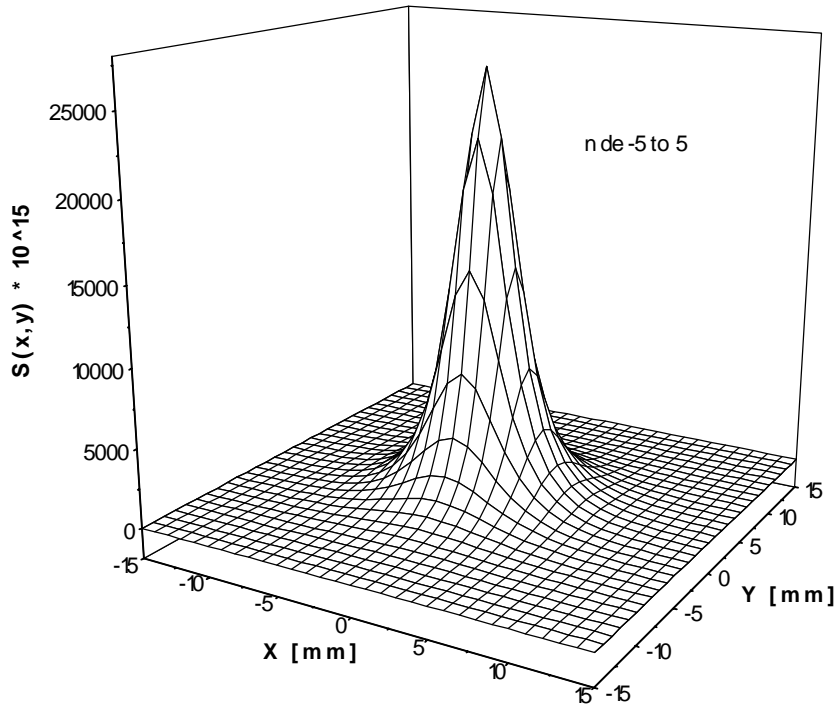


Fig. 09: Gráfico de $\sigma(x,y)$ para um número finito de termos da função Vq .

4.3 Detetor a Gás Sensível a Duas Dimensões

Para aplicações em física de altas energias foi proposto em 1968 um arranjo contendo um plano de fios paralelos dispostos entre dois planos condutores [14]. Este arranjo foi mais tarde empregado em diferentes estruturas para a localização bi-dimensional dos fótons absorvidos no detetor, geralmente envolvendo a introdução de outros eletrodos para a determinação das duas coordenadas de posição [15,16]. É possível entretanto decodificar as coordenadas de posição a partir de uma estrutura geométrica simples, muito próxima do arranjo original [17] (Fig. 10).

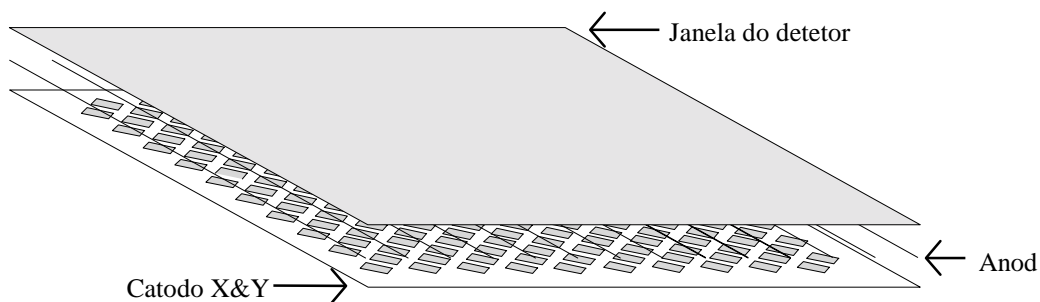


Fig. 10: Esquema para um contador multifilar.

Conforme ilustrado na Fig. 10, um dos planos condutores é substituído por um conjunto de ilhas amostradoras de carga induzida. Metade das ilhas é convenientemente conectada através de furos metalizados a pistas condutoras situadas numa camada

inferior, relacionadas a uma das coordenadas de posição. A outra metade das pistas é igualmente ligada a outras pistas, situadas em uma outra camada, relacionadas com a segunda coordenada. Fig. 11 mostra um detalhe das conexões. Também é mostrado na Fig. 11, em forma de círculo pontilhado, a largura a meia altura da distribuição de carga induzida por uma carga de avalanche localizada no plano anodo, a uma distância de 3.2mm.

Uma linha de retardo é associada à decodificação de cada coordenada de posição, de modo que para cada fóton detectado os sinais transmitidos pelas linhas de retardo são processados e registrados. O interesse principal do detetor a gás para localização bidimensional reside no fato de que o processo de aquisição de imagens é extremamente rápido, podendo chegar a uma taxa da ordem de 10^5 - 10^6 fótons por segundo. Uma vez registrados, os dados estão disponíveis para tratamento numérico. Este aspecto já o diferencia dos filmes, nos quais a imagem é armazenada mas deve ser 'revelada' ou digitalizada por um procedimento a parte. Por esta razão os detetores a gás bidimensionais são insubstituíveis em aplicações que exigem o levantamento de vários padrões de espalhamento em curtos intervalos de tempo.

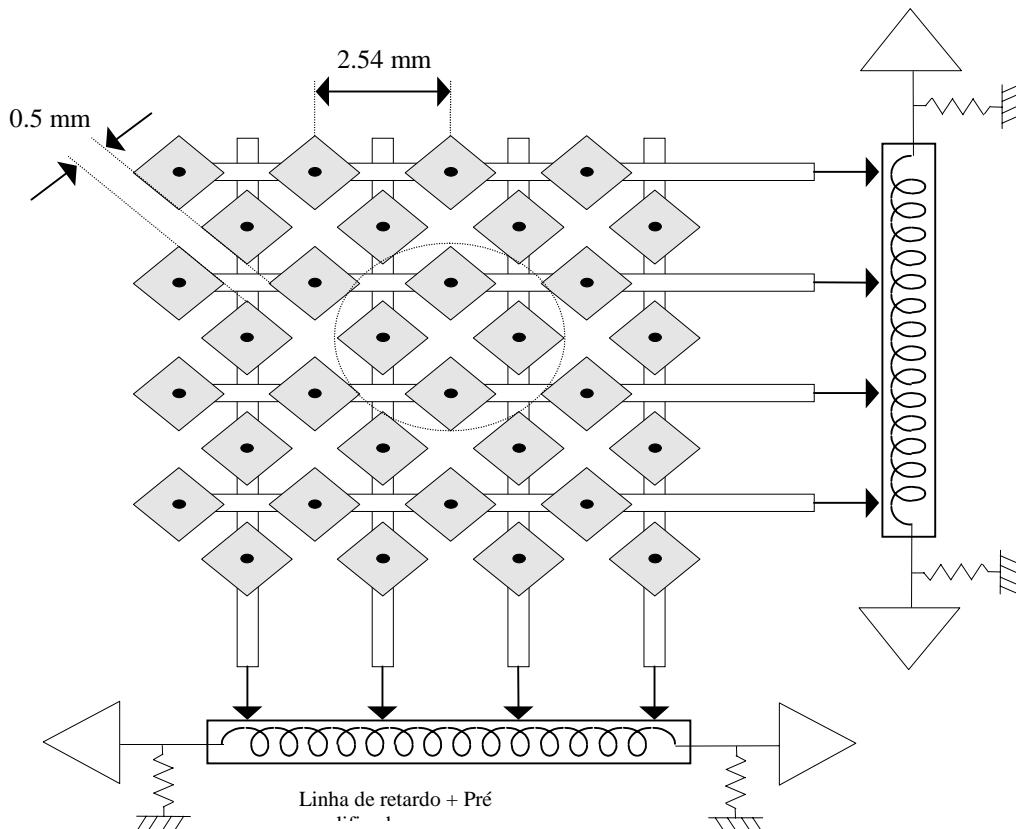


Fig. 11: Ilustração do arranjo para decodificação das coordenadas X&Y. O círculo pontilhado indica o tamanho da distribuição de carga induzida.

4.4 Processamento de Sinais

Graças ao processo de avalanche, um ganho da ordem de 10^4 no número de elétrons liberados por ionização é obtido nos detetores operando em regime de contador

proporcional. Mesmo assim a amplitude do pulso elétrico obtido a partir da absorção de um fóton de raios-x geralmente não supera 1 mili-volt. A primeira etapa de processamento do sinal emitido pelo detetor é portanto uma pré-amplificação, que torna o sinal analisável pelos módulos de processamento posteriores.

A próxima etapa envolve usualmente amplificação e modelagem, a fim de facilitar a separação entre sinal e ruído eletrônico, bem como de favorecer o levantamento da distribuição dos pulsos em amplitude. A distribuição em amplitudes relaciona-se com a distribuição em energia dos fótons detectados. Nos detetores sensíveis a posição, um módulo discriminador define o instante em que um pulso transmitido pela linha de retardo é considerado para a medida de tempo (V. Fig. 12). O intervalo de tempo entre os sinais provenientes das extremidades da linha de retardo corresponde à posição de incidência do fóton. Este intervalo é medido por um conversor tempo-amplitude, cujo sinal de saída é digitalizado e histogramado para fornecer o espectro de intensidade versus posição.

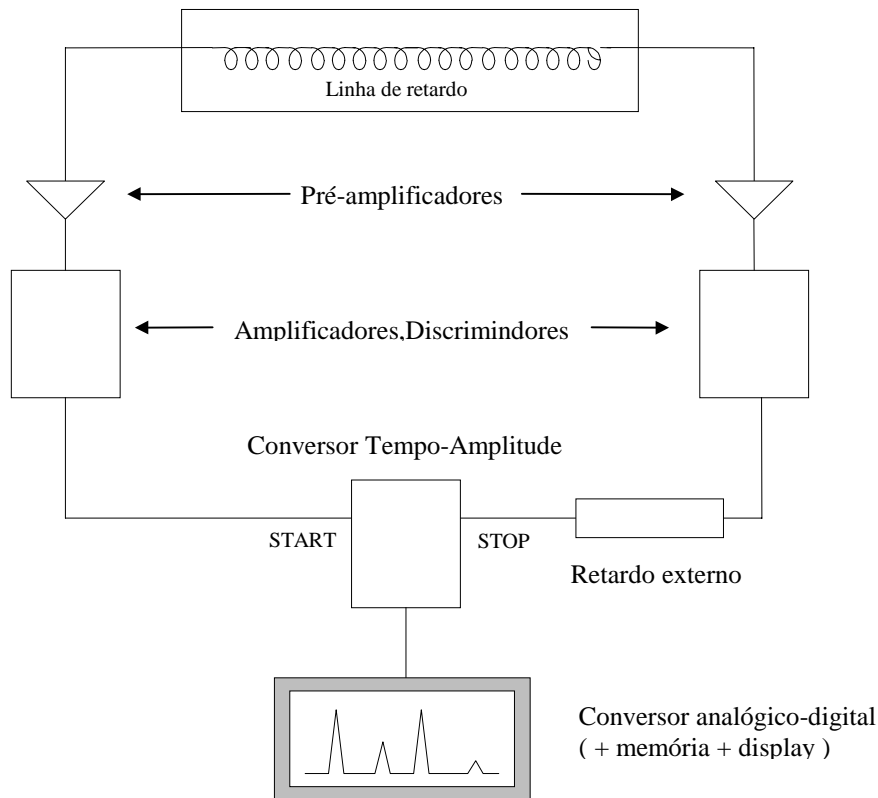


Fig. 12: Ilustração dos módulos de processamento de sinais envolvidos na detecção de uma coordenada de posição

No caso do detetor bidimensional, para cada fóton detectado são processadas as informações referentes a cada uma das coordenadas. Uma etapa suplementar combina as duas coordenadas e define um endereço de memória onde a posição do fóton é registrada. O conteúdo da memória pode ser continuamente exposto em forma de imagem ou histograma bidimensional.

Em todas as etapas de processamento - mesmo as etapas interiores ao detetor, como a transmissão de sinais pela linha de retardo - há campo para desenvolvimentos e realizações importantes. Deve-se salientar que estes desenvolvimentos supõem uma atividade que combine o conhecimento dos fenômenos físicos envolvidos, bem como das tecnologias disponíveis, principalmente em eletrônica e informática. A rápida evolução tecnológica, inclusive na produção de fontes de radiação, conferem a esta atividade um caráter acentuadamente dinâmico e multidisciplinar.

REFERÊNCIAS

- [1] G. L. Clark. *Applied X-Rays*. McGraw-Hill Book Company, Inc. (1955).
- [2] W. K. H. Panofsky. *Classical Electricity and Magnetism*. Addison-Wesley Publishing Company, Inc. (1964)
- [3] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. John Wiley & Sons, Inc. (1962).
- [4] K. Hübner. *Synchrotron Radiation*, in: CERN Accelerator School, Synchrotron Radiation and Free Electron Lasers, CERN 90-03 (1990).
- [5] R. Eisberg, R. *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles*. John Wiley & Sons (1974).
- [6] R. P. Feynman. *The Strange Theory of Light and Matter*. Princeton University Press (1985).
- [7] G. T. Herman. *Image Reconstruction from Projections, The Fundamentals of Computerized Tomography*. Academic Press (1980).
- [8] H. P. Klugg, L. E. Alexander, *X-Ray Diffraction Procedures for Polycrystalline and Amorphous Materials*. John Wiley & Sons (1954)
- [9] E. Fenyves, O. Haiman. *The Physical Principles of Nuclear Radiation Measurements*. Academic Press (1969).
- [10] Y. Amemiya, T. Matsushita, A. Nakagawa, Y. Satow, J. Miyahara, J. Chikawa. *Design and Performance of an Imaging Plate System for X-Ray Diffraction Study*. Nucl. Instrum. and Meth., A266, 645 (1988).
- [11] E. Gramsch, K. G. Lynn, M. Weber, B. DeChillo, J. R. McWilliams. *Silicon PIN Photodetectors in High Resolution Nuclear Spectroscopy*. Nucl. Instrum. and Meth. A311, 529 (1992).
- [12] C. J. Borkowski, M. K. Kopp. *New Type of Position-Sensitive Detectors of Ionizing Radiation Using Risetime Measurement*. Rev. of Sci. Instrum., 39, 10 (1968).
- [13] A. Gabriel. *Position Sensitive X-Ray Detector*. Rev. of Sci. Instrum. 48, 10 (1977).
- [14] G. Charpak, R. Bouclier, T. Bressani, J. Favier, C. Zupancic. *The Use of Multiwire Proportional Counters to Select and Localize Charged Particles*. Nucl. Instrum. and Meth. 62, 262 (1968).
- [15] R. Lewis, I. Sumner, A. Berry, J. Bordas, A. Gabriel, G. Mant, B. Parker, K. Roberts, J. Worgan. *Multiwire X-Ray Detector Systems at the Daresbury SRS*. Nucl. Instrum. and Meth. A273, 773 (1988).
- [16] G. C. Smith, B. Yu, J. Fischer, V. Radeka, J. A. Harder. *High Rate, High Resolution, Two-dimensional Gas Proportional Detectors for X-Ray Synchrotron Radiation Experiments*. Nucl. Instrum. and Meth. A323, 78 (1992).
- [17] A. F. Barbosa. *Use of a Multilayer Printed Circuit Board as the Position Sensing Electrode in a M.W.P.C.* Aceito para Publicação. Nucl. Instrum. and Meth. (1995).