



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE – UFS
PRO-REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA – POSGRAP
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA - PPGFI

**DOSIMETRIA DE RADIAÇÃO GAMA COM ESPECTROSCOPIA DE
INFRAVERMELHO POR TRANSFORMADA DE FOURIER**

LUCAS SILVA TEIXEIRA

São Cristóvão (SE)

2025

LUCAS SILVA TEIXEIRA

**DOSIMETRIA DE RADIAÇÃO GAMA COM ESPECTROSCOPIA DE
INFRAVERMELHO POR TRANSFORMADA DE FOURIER**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: José Joatan Rodrigues Júnior

São Cristovão (SE)

2025

FICHA CATALOGRÁFICA

LUCAS SILVA TEIXEIRA

DOSIMETRIA DE RADIAÇÃO GAMA COM ESPECTROSCOPIA DE
INFRAVERMELHO POR TRANSFORMADA DE FOURIER

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Sergipe, como parte dos requisitos para a obtenção do Título de Mestre em Física. Esta dissertação foi julgada e aprovada pela comissão abaixo assinada em 16 de julho de 2025.

São Cristóvão, Sergipe, Brasil

Prof. Dr. José Joatan Rodrigues Júnior
– Orientador Universidade Federal de
Sergipe – UFS

Prof. Dr. Francesco d’Errico – Membro
Externo Yale University

Prof. Dr. Márcio André Rodrigues
Cavalcanti de Alencar – Membro
Interno Universidade Federal de
Sergipe – UFS

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais, Patrícia e Carlos Kleber, por todos os sacrifícios que fizeram por mim e sempre me apoiarem.

Às minhas avós, Lêda e Marta, que deram apoio aos meus estudos durante toda a minha vida.

Ao meu primo Bruno, que muito me ajudou ensinando como escrever textos acadêmicos e na revisão desta dissertação.

À toda a minha família que me deu o apoio que precisei.

À minha namorada Sâmia Kariny, que nunca me negou apoio, carinho e incentivo.

Aos meus amigos: Otacílio de Carvalho, Janaina Grazielle, Clarisse Lopez, Elifas Neto, Érico e Vítor Augusto, Karla Victória, Mariana Costa, Nadine Rocha e Luana Yu, que me deram coragem, determinação e força para chegar tão longe.

Aos colegas da pós-graduação: Luís Davi Santos, Renato Willy, Geraldine Banda, Adnan Raza, Jamil Ahmad, Otávio Mello e Benjamin Sottie, que me ajudaram a aprender muito mais do que física.

A CAPES e o CNPq pelo auxílio financeiro.

Ao SergipeTec pelas medidas que foram realizadas neste trabalho e ao grupo de Óptica que me acolheu e me trouxe para uma área da física pela qual eu me apaixonei.

Ao professor José Joatan Rodrigues Junior, pela orientação e paciência com meus erros e excentricidades.

RESUMO

A radiação gama é uma das mais energéticas do espectro eletromagnético, possuindo importantes aplicações na ciência e na medicina, mas também possuindo vários riscos no seu uso devido aos danos que pode causar nos seres vivos, sendo assim classificada como radiação ionizante. A técnica de espectroscopia Fourier Transform Infrared – FTIR é hoje uma técnica rápida e eficiente para análise de materiais orgânicos, podendo ser usada para identificar e localizar grupos funcionais. Neste trabalho, foi realizado um estudo da dosimetria da radiação gama em treonina, um aminoácido proteínogênico que forma o material genético dos seres humanos e cuja presença é necessária na dieta, utilizando a espectroscopia FTIR para identificar os grupos amina e ácido carboxílico. Ao comparar com a literatura, é possível identificar quebras de ligações interatômicas dentro da molécula de treonina, sendo usadas amostras que receberam dosagens de radiação diferentes. Com isso é possível identificar danos causados por radiação ionizante a um tipo de molécula, podendo proporcionar oportunidades de estudo futuras usando outras moléculas orgânicas e diferentes tipos de radiação ionizante.

PALAVRAS-CHAVE: dosimetria, espectroscopia FTIR, aminoácidos

ABSTRACT

Gamma radiation is one of the most energetic radiations in the electromagnetic spectrum and has important applications in science and medicine. However, it also poses several risks due to the damage it can cause to living beings and is therefore classified as a form of ionizing radiation. The Fourier Transform Infrared (FTIR) spectroscopy technique is currently a fast and efficient technique for analyzing organic materials and can be used to identify and locate functional groups. In this study, a study of the dosimetry of gamma radiation in threonine, a proteinogenic amino acid that forms the genetic material of human beings and whose presence is necessary in the diet, was carried out using FTIR spectroscopy to identify the amine and carboxylic acid groups. By comparing with the literature, it is possible to identify breaks in interatomic bonds within the threonine molecule, using samples that received different radiation doses. This makes it possible to identify damage caused by ionizing radiation to a type of molecule, which may provide opportunities for future studies using other organic molecules and different types of ionizing radiation.

KEYWORDS: dosimetry, FTIR spectroscopy, amino acids

LISTA DE FIGURAS

2.1 – Espectro Eletromagnético.....	16
2.2 – Paul Ulrich Villard.....	17
2.3 – Unidades de radiação nos sistemas tradicional e no SI.....	18
2.4 – Classificação de dosímetros passivos com base no sinal de leitura.....	21
2.5 – a: Diagrama esquemático da geração de radicais livres por irradiação; b: Espectros de absorção e seus primeiros espectros derivados de um dosímetro EPR após irradiação; c: Avaliação de doses absorvidas com base no método de “dupla integração”; d: Avaliação de doses absorvidas com base no método de “amplitude pico a pico.....	22
2.6 – a: Diagrama esquemático de TL onde a parábola corresponde ao estado eletrônico da armadilha. B: Rampa de temperatura típica para estimular a luminescência após o carregamento em TL.....	24
2.7 – Variação da absorbância em 585 nm em função da dose absorvida. Observa-se uma linearidade até 30 Gy.....	26
2.8 – Gerador de raios-x.....	27
2.9 – Esquema de uma radiografia.....	27
3.1 – Aminoácidos e suas classificações.....	30
3.2 – Fórmula química, fórmula estrutural e modelo 3d bola e vara da L-treonina.....	31
3.3 – Representação esquemática de um interferômetro, peça central dos espectrômetros FTIR modernos.....	32
3.4 – Esquemática de como seria o espectro FTIR da água.....	33
3.5 – Patilhador utilizado para a obtenção de pastilhas de KBr.....	35
3.6 – Esquema do método ATR.....	36
3.7 – Espectrômetro FTIR do Sergipe Tec que foi usado neste trabalho.....	36
4.1 – Morfologia dos cristais de L-treonina.....	38

4.2 – (a) Cristal de L-treonina crescido pelo método de evaporação lenta do solvente. No centro do cristal é possível distinguir a semente utilizada. (b) Monocristal de L-treonina.....	39
4.3 – Amostras de L-treonina separadas com a mesma massa para serem irradiadas nas mesmas condições, mantendo uma amostra de referência sem irradiação.....	39
4.4 – Foto do irradiador SOPHIA.....	40
4.5 – Foto da parte interna de uma das gavetas do irradiador SOFIA que comporta as fontes radioativas de Césio-137.....	40
4.6 – Representação da fórmula química da L-treonina (a) e dos dois radicais formados pela interação da radiação com os cristais (b) e (c). O radical (c) é o mais provável.....	41
4.7 – Espectro de FTIR de L-treonina, usando pastilhas de KBr, sem irradiação (Preto) e irradiada com uma dose de 13 Gy.....	42
4.8 – Espectros de FTIR de cristais de L-Treonina e DL-Treonina, verifica-se a semelhança com os espectros da figura 4.7.....	42
4.9 – Gráfico da transmitância pelo número de onda das amostras irradiadas em relação a referência.....	43
4.10 – Gráfico da transmitância pelo número de onda das amostras irradiadas em relação a referência.....	44
4.11 – Variação da transmitância em 2873 cm^{-1} . No detalhe, dados do ajuste linear até a dose de 12 Gy.....	45
4.12 – Transmitância normalizada na região de $1300\text{ a }1600\text{ cm}^{-1}$, com destaque às bandas de flexão do grupo CH_3	46
4.13 – Variação da transmitância normalizada das bandas relacionadas à flexão do grupo CH_3 em $1478\text{ e }1455\text{ cm}^{-1}$	46

LISTA DE TABELAS

1 – Fatores de Ponderação recomendados para cada órgão ou tecido do corpo humano.....	19
2 – Os 20 aminoácidos proteinogênicos formadores do código genético, com suas respectivas abreviações e pH de dissociação.....	29

LISTA DE ABREVIATURAS

FTIR - Fourier Transform Infrared

eV - Elétron-volt

cm - Centímetro

m - Metro

Hz - Hertz

Gy - Gray

Sv - Sievert

Bq - Bequerel

SI- Sistema Internacional

D - Dose Absorvida

H- Dose Equivalente

E- Dose Efetiva

ICRP - Comissão Internacional de Proteção Radiológica

EPR - Ressonância Paramagnética de Elétrons

CW- Onda Contínua

XO - Xilenol

FXG - Fricke Xilenol Gel

PVA - Álcool Polivinílico

GTA - Glutaraldeído

Fe- Ferro

C - Carbono

H - Hidrogênio

N- Nitrogênio

O - Oxigênio

pI - Ponto Isoeletrônico

KBr - Brometo de Potássio

ATR- Reflexão Total Atenuada

Zn - Zinco

Se - Selênio

Ge - Germânio

Å - Angström

°C - Celsius

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	13
2 DOSIMETRIA	15
2.1 Radiação Ionizante	15
2.2 O Espectro Eletromagnético	15
2.3 Radiação Gama	16
2.4 Unidades Dosimétricas	18
2.4.1 Dose Absorvida (D).....	18
2.4.2 Dose Equivalente (H).....	18
2.4.3 Dose Efetiva (E).....	19
2.5 Dosímetros	20
2.6 Exemplos de Dosímetros.....	21
2.6.1 Ressonância Paramagnética de Elétrons (EPR)	21
2.6.2 Dosímetros Termoluminescentes	23
2.6.3 Dosímetro Fricke Gel.....	24
2.7 Aplicações na Medicina	26
3 METODOLOGIA E MATERIAIS.....	29
3.1 Aminoácidos	29
3.2 L-treonina	31
3.3 Espectroscopia FTIR	32
3.4 Brometo de Potássio (KBr)	36
3.5 Reflexão Total Atenuada.....	36
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	39
4.1 Crescimento dos Cristais	39
4.2 Irradiação das Amostras	41
4.3 Medidas de FTIR – KBr	43
4.4 Medidas de FTIR – ATR.....	44
5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS.....	49
REFERÊNCIAS.....	49

1 INTRODUÇÃO

Apesar de seu potencial danoso à matéria viva, a radiação ionizante possui ampla aplicação nas ciências e na tecnologia. Na medicina, é utilizada tanto para diagnóstico quanto para tratamento, como nas radiografias, tomografias e na radioterapia. Por outro lado, sua interação com organismos vivos pode gerar efeitos adversos, desde danos celulares e mutações genéticas até o desenvolvimento de neoplasias (Okuno, 2018). Nesse contexto, torna-se essencial o desenvolvimento de métodos confiáveis e precisos para a quantificação da exposição à radiação, consolidando o papel crucial da dosimetria.

A dosimetria de radiação é o campo responsável por quantificar a dose de radiação absorvida por materiais ou organismos. Entre os diferentes métodos disponíveis, os dosímetros físicos se destacam pela reprodutibilidade e pela capacidade de mensurar diretamente os efeitos da radiação sobre materiais específicos (Yang *et al.*, 2024). Atualmente, diversos materiais vêm sendo investigados como potenciais meios dosimétricos, incluindo filmes poliméricos, semicondutores, géis radiocrômicos e cristais orgânicos. Nesse contexto, este trabalho propõe investigar o comportamento da L-treonina frente à irradiação gama, utilizando a espectroscopia de infravermelho com transformada de Fourier (FTIR) como ferramenta analítica.

A espectroscopia FTIR é uma técnica amplamente consolidada na caracterização de compostos orgânicos. Por meio da análise das vibrações moleculares induzidas pela radiação infravermelha, obtém-se uma espécie de “impressão digital” das substâncias, permitindo a identificação e quantificação de grupos funcionais específicos (Anagaw *et al.*, 2025). Quando aplicada a materiais previamente irradiados, a FTIR pode revelar alterações estruturais, como quebra de ligações, formação de radicais livres e mudanças na geometria molecular, tornando-se promissora para fins dosimétricos (Pawlukojc *et al.*, 2001).

Dentro desse panorama, a L-treonina — um aminoácido proteínogênico essencial — surge como um candidato promissor para aplicações dosimétricas. Sua estrutura relativamente simples, a presença de grupos funcionais ativos (hidroxila e amina), além da boa solubilidade em água e baixa toxicidade, favorecem seu manuseio experimental. Estudos prévios indicam que certos aminoácidos formam produtos estáveis de irradiação, capazes de alterar propriedades espectroscópicas detectáveis por EPR ou FTIR (Rocha, 2018; Souza *et al.*, 2019). No caso da L-treonina, há evidências de que sua exposição à radiação gera radicais livres específicos, que afetam seus padrões vibracionais no infravermelho (Gauthier Vanhaelewy *et al.*, 2025)

Este trabalho se insere na busca por métodos dosimétricos acessíveis, seguros e reprodutíveis, especialmente em faixas de baixas doses relevantes à prática da radioterapia. A

proposta consiste na utilização de cristais triturados de L-treonina como meio dosimétrico, explorando uma abordagem experimental simples, sem a necessidade de materiais caros ou de preparo complexo. Ademais, o uso da técnica de reflexão total atenuada (ATR-FTIR) proporciona análises rápidas, com mínima preparação de amostras, além de ser um método não destrutivo e altamente sensível para investigar alterações superficiais causadas pela radiação (Bunaciu; Hoang; Aboul-Enein., 2015).

O objetivo deste trabalho é avaliar a viabilidade do uso da espectroscopia FTIR, aplicada a cristais triturados de L-treonina, como método de dosimetria de radiação gama. A ênfase está na análise da resposta linear observada nas bandas vibracionais associadas ao grupo metila (CH_3), em doses relevantes para aplicações médicas. A confirmação dessa abordagem pode representar um avanço no desenvolvimento de sistemas dosimétricos acessíveis e de fácil aplicação, além de fomentar estudos futuros envolvendo outros aminoácidos e diferentes tipos de radiação.

Este trabalho foi dividido da seguinte maneira.

O capítulo 2 apresenta uma explicação sucinta do que é dosimetria, falando sobre o espectro eletromagnético, focando especialmente na radiação gama, quais as unidades dosimétricas, o que são dosímetros e descrevendo os vários tipos e o uso da dosimetria na medicina.

O capítulo 3 contém uma descrição do que são aminoácidos com foco na treonina, suas propriedades e a espectroscopia FTIR.

O capítulo 4 descreve como foram preparadas as amostras, os resultados obtidos e uma discussão sobre seus significados.

O capítulo 5 apresenta as conclusões e perspectivas futuras para este trabalho e como outros podem ser realizados usando a espectroscopia FTIR, usando materiais e radiações diferentes.

2 DOSIMETRIA

A dosimetria de radiação é o processo de medição da radiação, natural ou de fontes artificiais, absorvida por um corpo ou objeto. A definição da dose absorvida ou depositada é extremamente importante para pesquisa científica e em áreas como a medicina. A radiação pode ser dividida em ionizante e não ionizante, neste trabalho trataremos somente da radiação ionizante.

2.1 Radiação Ionizante

Quando a radiação possuir energia suficiente para arrancar elétrons dos orbitais de átomos neutros, transformando-os em íons, diz-se que ela é ionizante. Isso faz com que elétrons sejam ejetados e o átomo é ionizado, ficando com excesso de prótons, e, portanto, carregado positivamente, esse processo é conhecido como formação de par iônico. O átomo com carga positiva é o par iônico positivo e o elétron ejetado é o par iônico negativo (Okuno, 2018). A quantidade de energia necessária para arrancar os elétrons aumenta para aqueles que estejam nas camadas mais internas, pois estes elétrons estarão mais próximos do núcleo atômico e, portanto, sofrerão maior atração pelos prótons dentro deste, criando um efeito de blindagem que os mantém fortemente atraídos.

A radiação ionizante pode ionizar os átomos de maneira direta ou indireta. Partículas carregadas como elétrons, prótons, partículas α e íons pesados são radiações diretamente ionizantes, pois depositam suas energias no meio através de interações coulombianas diretas com os elétrons orbitais dos átomos no meio. Já a radiação gama são ondas eletromagnéticas e indiretamente ionizantes, pois transferem sua energia para partículas carregadas no meio, liberando-as, de forma que estas depositam a energia recebida através de interações coulombianas diretas com os elétrons orbitais dos átomos no meio.

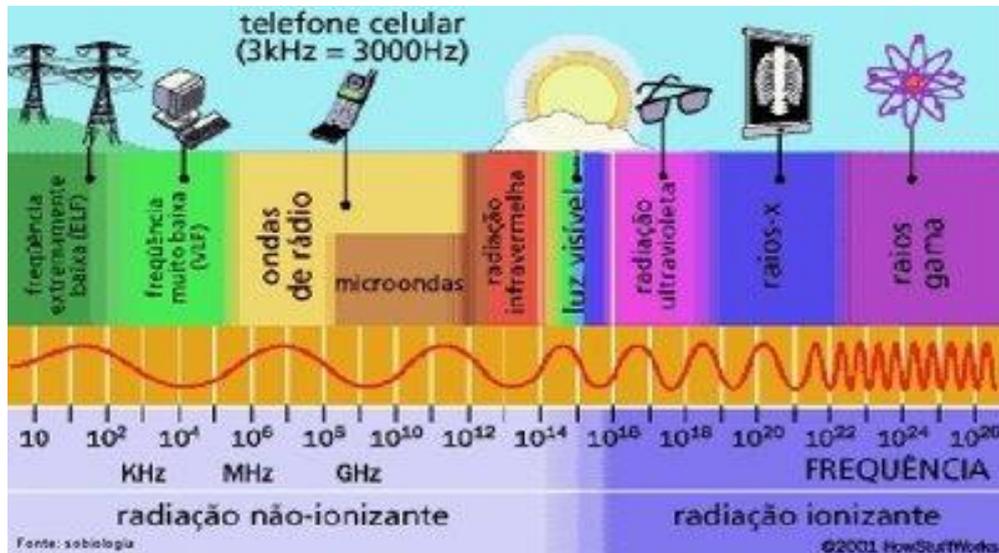
2.2 O Espectro Eletromagnético

As ondas eletromagnéticas diferem entre si através de suas frequências, comprimentos de onda, energias e a maneira pela qual são produzidas. Chama-se o conjunto de todas as ondas eletromagnéticas de espectro eletromagnético (Figura 2.1). No vácuo, todas as ondas eletromagnéticas possuem a mesma velocidade, representada por c , que é a velocidade da luz. Por possuírem uma velocidade constante, o comprimento de onda e a frequência de uma onda eletromagnética terão uma relação inversamente proporcional, da maneira dada pela fórmula

seguinte, onde λ é o comprimento de onda, dado em m e f é a frequência dada em s^{-1} (de Oliveira, 2019):

$$c = \lambda * f$$

Figura 2.1: Espectro eletromagnético



Fonte: SEED, s.d.

A Comissão de Comunicações Federal dos Estados Unidos define radiação ionizante como aquela que possui energia de fóton superior a 10 eV, o que é equivalente a um comprimento de onda de 124nm, na região do ultravioleta no espectro eletromagnético. Porém, neste trabalho, as ondas que serão relevantes são os raios gama. Essa é a radiação do espectro eletromagnético com maior frequência e menor comprimento de onda e é, em geral, a mais perigosa, podendo causar danos em seres vivos como mutações e tumores.

2.3 Radiação Gama

A radiação gama foi descoberta em 1900 pelo químico francês Paul Ulrich Villard (figura 2.2) ao perceber que havia uma radiação emitida por sais de rádio que conseguiam penetrar chapas de chumbo capazes de bloquear radiação alfa.

Figura 2.2: Paul Ulrich Villard



Fonte: Data, s.d.

Villard sabia que a radiação descrita por ele era mais poderosa do que os tipos de raios de rádio descritos anteriormente, que incluíam os raios beta, inicialmente descritos como "radioatividade" por Henri Becquerel em 1896, e os raios alfa, descobertos como uma forma menos penetrante de radiação por Ernest Rutherford, em 1899. No entanto, Villard não considerou nomeá-los como um tipo fundamental diferente. (L'Annunziata, 2007)

Posteriormente, Rutherford reconheceu que a radiação que Villard havia descoberto era diferente das outras conhecidas pois não possuía carga, já que não era defletida pela ação de um campo magnético. Ele a nomeou de radiação gama, de acordo com as outras que haviam sido nomeadas com as primeiras letras do alfabeto grego.

A radiação gama é a que possui as ondas de maior frequência do espectro e, portanto, as de maior energia. A frequência da radiação gama é superior a 10^{19} Hz e seu comprimento de onda é menor que 10^{-11} m, são produzidas geralmente por elementos radioativos, podem danificar células vivas originando tumores. No entanto, em doses controladas e de rápida exposição, são usadas em radioterapia para tratamento de cânceres e no diagnóstico de tumores em alguns órgãos do corpo, como num exame de cintilografia.

Inicialmente, a distinção entre raios gama e raios X era feita com base na frequência dessas radiações. Com a produção de raios mais energéticos, a fronteira entre raios X e raios gama no espectro eletromagnético deixou de ser nítida, de modo que há sobreposição das faixas. A distinção entre esses dois tipos de radiação é na forma como são produzidos, pois enquanto os raios X são gerados pelas transições orbitais dos elétrons mais próximos ao núcleo do átomo, a radiação gama é resultante de reações que ocorrem no núcleo do átomo.

2.4 Unidades Dosimétricas

Três diferentes quantidades de dose de radiação (medidas ou calculadas) são importantes na dosimetria. São elas: "dose absorvida", "dose equivalente" e "dose efetiva".

Atualmente, existem dois sistemas de unidades de radiação em uso normal no mundo. Eles são as unidades convencionais ou tradicionais de rad/rem/curie e as unidades mais recentes do Sistema Internacional (SI) de gray/sievert/becquerel. A figura 2.3 mostra os nomes das unidades dos dois sistemas, os Estados Unidos costumam utilizar as unidades tradicionais enquanto outros países utilizam as unidades do Sistema Internacional (SI) (USA, 2018).

Figura 2.3 - Unidades de radiação nos sistemas tradicional e no SI

Sistema de Unidades	Quantidades de radiação			
	Dose Absorvida	Dose Equivalente	Dose efetiva	Radio-atividade
SI	gray (Gy)	sievert (Sv)	sievert (Sv)	becquerel (Bq)
Traditional	rad	rem	rem	Curie (Ci)

Fonte: adaptado de USA, 2018

2.4.1 Dose Absorvida (D)

À medida que a radiação ionizante atravessa a matéria, parte ou toda a sua energia é absorvida por ela. A quantidade absorvida é chamada de dose absorvida, e a medida dessa dose é dada em rads ou grays (Gy) (Henriques, 2012). Essa é a unidade utilizada neste trabalho.

É definida como o quociente de $d\varepsilon$ por dm , onde $d\varepsilon$ é a energia média transferida para a matéria de massa dm por ionização. Em termos algébricos, ela é representada pela equação 1:

$$D = \frac{d\varepsilon}{dm}$$

A unidade de dose absorvida é o gray (Gy), que equivale a 1 J/Kg.

2.4.2 Dose Equivalente (H)

Existem diferenças relativas entre vários tipos de radiação, como raios X e raios gama versus nêutrons, prótons, partículas alfas, íons pesados, que têm a ver com a forma como cada um deles deposita energia espacialmente na matéria. Comitês científicos internacionais

atribuíram um Fator de Ponderação de Radiação (FPR) para cada tipo de radiação com base em quantidades medidas de várias radiações que produziriam um efeito equivalente na matéria.

Assim, a dose equivalente é dada pelo produto da dose absorvida pelo FPR (ω_R), na equação 2. O resultado ainda está em unidades de energia por unidade de massa, agora referida como rem (a dose absorvida em rads multiplicada pelo Fator de Ponderação de Radiação) ou sievert (a dose absorvida em Gy multiplicada pelo Fator de Ponderação de Radiação):

$$H_T = \omega_R \cdot D_T$$

2.4.3 Dose Efetiva (E)

Os órgãos e tecidos não têm uma sensibilidade única à radiação ionizante. A probabilidade de efeitos estocásticos também está relacionada com radiosensibilidade dos órgãos e tecidos. A dose efetiva é a grandeza dosimétrica que quantifica esta relação. A dose efetiva é definida como a soma ponderada das doses equivalentes em todos os tecidos e órgãos do corpo e é representada pela equação 3:

$$E = \sum_T \omega_T D_T$$

Sua unidade é rem ou sievert. Os fatores de ponderação ω_T recomendadas pela ICRP N° 103 (Valentin, 2007) estão apresentados na tabela 1 a seguir.

Tabela 1: Fatores de Ponderação recomendados para cada órgão ou tecido do corpo humano.

Órgão ou Tecido	ω (ICRP 103)
Cólon	0.12
Estômago	0.12
Gônadas	0.08
Médula óssea vermelha	0.12
Pulmões	0.12
Mamas	0.12
Esôfago, Bexiga e Fígado	0.04
Tireóide	0.04
Superfície óssea	0.01
Pele	0.01
Glândulas salivares	0.01
Cérebro	0.01

Restante do Corpo ¹	0.12
--------------------------------	------

Fonte: Henriques, 2012.

2.5 Dosímetros

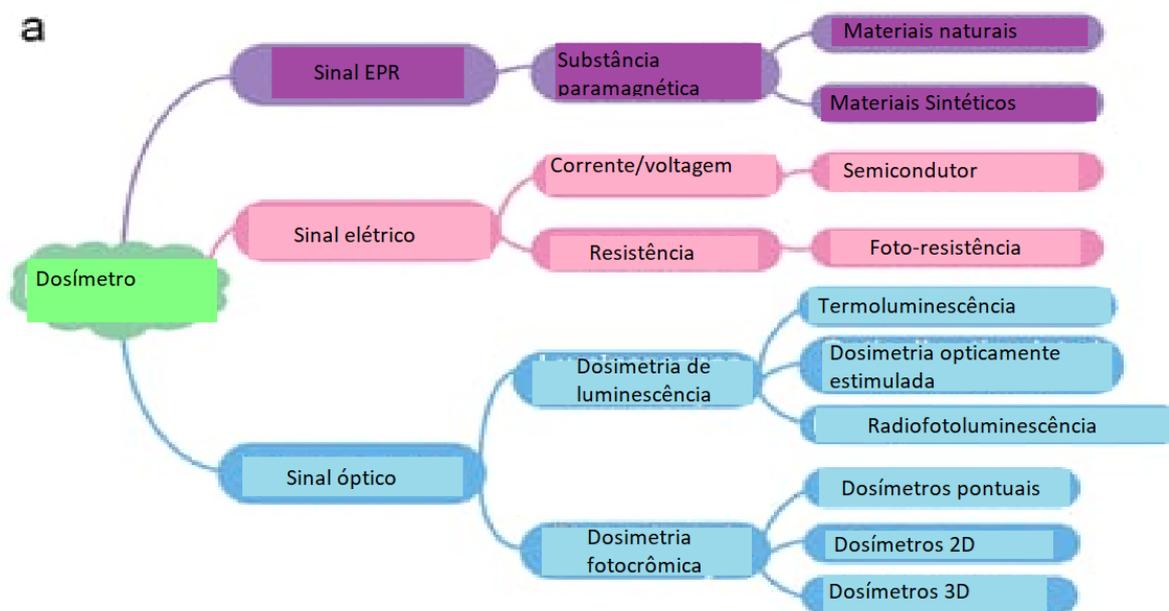
O processo da dosimetria é realizado por um dosímetro, que é um dispositivo que permite a medição de uma propriedade que muda de forma previsível e reproduzível com a dose absorvida. Os dosímetros podem ser divididos em dosímetros ativos e dosímetros passivos, de acordo com o método de detecção.

Dosímetros ativos transferem a intensidade da irradiação para um sinal elétrico baseado nos efeitos fotovoltaicos ou fotocondutores e podem fornecer uma taxa de dose instantânea ou intensidade luminosa. Exemplos de dosímetros ativos incluem câmaras de ionização, detectores de cintilação e detectores semicondutores. Já nos dosímetros passivos, a energia depositada é pré-armazenada cumulativamente no meio por meio de certos processos físicos ou químicos iniciados pela interação da radiação com a matéria, que podem ser lidos posteriormente mediante um estímulo externo.

Como resultado, apenas informações de dose integradas são fornecidas por um dosímetro passivo. Em comparação, os dosímetros ativos podem fornecer a intensidade instantânea ou as informações de dose integradas, enquanto uma fonte de alimentação combinada com processamento de dados em tempo real ou comunicação de campo próximo geralmente é necessária para obter as informações de dose integradas (Yang *et al*, 2024). Na figura 2.4 é esquematizado os principais tipos de sinais que são utilizados para determinação de dose com dosímetros.

Figura 2.4 - Classificação de dosímetros passivos com base no sinal de leitura

¹ Restante do corpo: supre-renais, região extratorácica, vesícula biliar, coração, rins, gânglios linfáticos, músculo, mucosa oral, pâncreas, próstata, intestino delgado, baço, timo, útero/colo do útero.



Fonte: adaptado de Yang *et al*, 2024.

Na próxima seção vamos citar três exemplos de dosimetria de radiação ionizante: dosímetros EPR, termoluminescentes, por sinal eletrônico, e de Fricke gel.

2.6 Exemplos de Dosímetros

2.6.1 Ressonância Paramagnética de Elétrons (EPR)

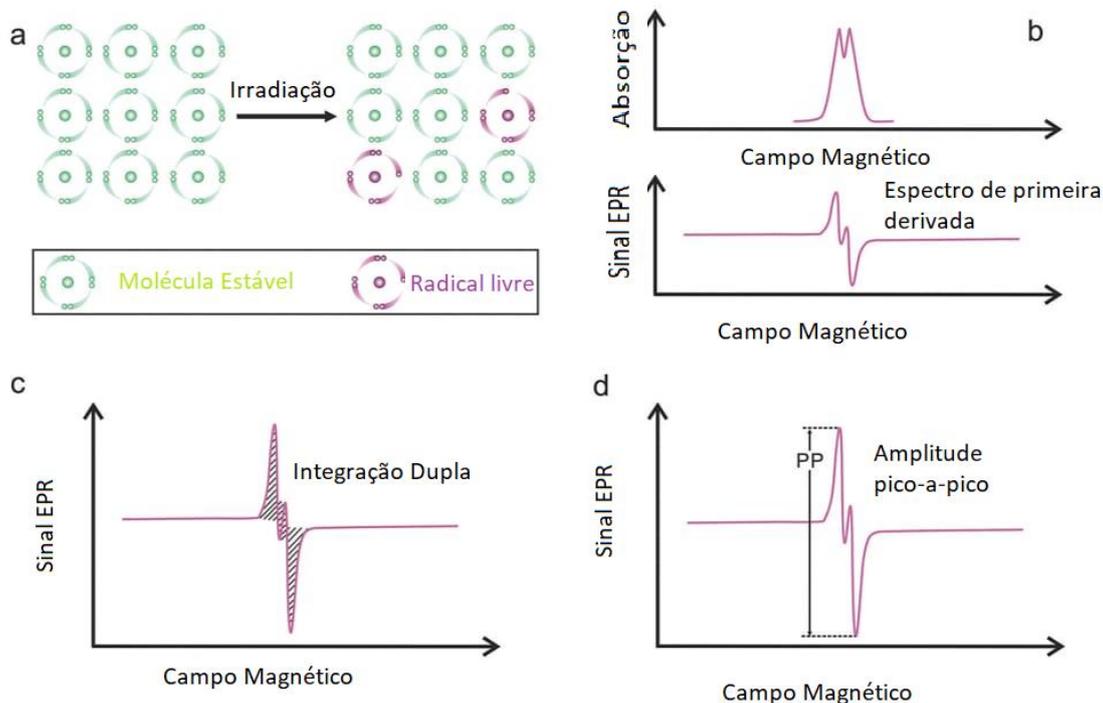
Ao expor materiais sólidos à radiação ionizante, são criados grandes números de elétrons e lacunas que podem ser aprisionados por certos defeitos e/ou impurezas. Esses defeitos podem passar de um estado diamagnético com apenas elétrons pareados para um estado paramagnético com elétrons desemparelhados, ou vice-versa. Portanto, certos componentes nos espectros de EPR podem ser sensíveis à radiação e serem usados para dosimetria.

Em sistemas práticos de dosimetria EPR, espécies paramagnéticas são produzidas sob a forma de radicais, após exposição à radiação. Em um ambiente gasoso ou líquido, esses radicais são muito reativos e instáveis, mas podem ser estáveis em estado sólido. A concentração da quantidade de radicais induzidos por radiação geralmente varia com a dose absorvida dentro de uma determinada faixa de dose. Além disso, a intensidade do sinal EPR integrado é proporcional ao número de radicais de um determinado tipo, permitindo assim a dosimetria EPR. Um sistema dosímetro EPR requer calibração, avaliando a intensidade do sinal

EPR sensível à dose para um conjunto de amostras com doses de exposição conhecidas ou expondo a amostra a doses adicionais calibradas, de forma apropriada.

Na prática, apenas a espectroscopia EPR de onda contínua (CW) é usada em aplicações de dosimetria, onde a absorção de micro-ondas e frequência fixa é monitorada enquanto se varre a magnitude de um campo magnético externo, o que altera a separação de energia entre os estados de spin dos elétrons. Tal medição normalmente possui ruído de baixa frequência. A solução para este problema aplicada na espectroscopia EPR-CW é modular a amplitude do campo magnético por um sinal de alta frequência (cerca de 100 kHz) de pequena amplitude (alguns mT) e filtrar o componente no espectro de absorção nessa frequência. Como resultado, os espectros EPR-CW em geral têm um formato de primeira derivada do espectro de absorção (figura 2.5b). Portanto, avaliar a intensidade total de um componente EPR, ou seja, a área sob a curva de absorção não derivada, requer a integração dos espectros registrados duas vezes sobre o eixo do campo magnético (figura 2.5c). Para espectros de EPR que se estendem por uma faixa considerável de campo magnético, tal procedimento pode ser seriamente afetado por amplos sinais de fundo, mesmo que estes tenham apenas uma pequena amplitude e sejam difíceis de serem percebidos nos espectros. Uma alternativa atraente, portanto, é avaliar a intensidade do sinal por meio da amplitude pico a pico nos espectros da primeira derivada. (figura 2.5d). (Yang *et al*, 2024).

Figura 2.5: a: Diagrama esquemático da geração de radicais livres por irradiação; b: Espectros de absorção e seus primeiros espectros derivados de um dosímetro EPR após irradiação; c: Avaliação de doses absorvidas com base no método de “dupla integração”; d: Avaliação de doses absorvidas com base no método de “amplitude pico a pico”



Fonte: adaptado de Yang *et al.*, 2024.

2.6.2 Dosímetros Termoluminescentes

A termoluminescência (TL) foi proposta pela primeira vez para dosimetria em 1953 (Daniels *et al.*). Desde então, esforços consideráveis têm sido dedicados à melhoria do desempenho dos materiais e ao desenvolvimento de novos materiais de TL. Atualmente, diversos dosímetros de TL estão disponíveis comercialmente, como compostos de flúor dopados (LiF e CaF_2), óxidos simples (Al_2O_3 e BeO), boratos (MgB_4O e $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$) e sulfatos (CaSO_4). Eles são os dosímetros mais comuns para aplicações encontradas no cotidiano, como avaliação de radiologistas, bem como em dosimetria ambiental e clínica.

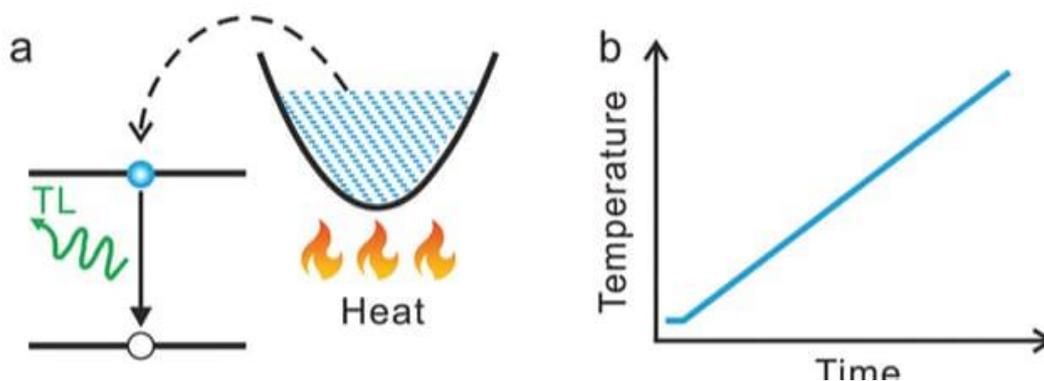
A maioria dos fósforos inorgânicos consiste em um semicondutor ou isolante de banda larga como hospedeiro, no qual elementos dopantes são incorporados como emissores de luz.

Dependendo da natureza do dopante e do hospedeiro, da combinação hospedeiro-dopante e das interações eletrônicas entre dopantes e hospedeiros, as propriedades de emissão dos fósforos podem ser ajustadas do UV ao infravermelho próximo, e compostos adequados estão atualmente disponíveis para uma ampla gama de aplicações. Além disso, o aprisionamento e o desarmamento de elétrons em níveis de defeito, por exemplo, dopantes e defeitos intrínsecos, podem dar origem a funcionalidades adicionais, como armazenamento de portadores de carga e extinção de luminescência.

Em alguns materiais luminescentes, a energia depositada pode ser armazenada de forma estável na forma de cargas aprisionadas, e o número de cargas aprisionadas é geralmente proporcional à energia depositada, pelo menos em uma determinada faixa de irradiação. Se as cargas retidas estiverem estáveis até a medição, e o número de cargas retidas puder ser lido mediante estímulo externo, esses materiais luminescentes podem ser usados para dosimetria de radiação, em que a intensidade da luminescência está relacionada à dose absorvida.

A dosimetria TL baseia-se na liberação de cargas aprisionadas na forma de emissão de luz mediante estimulação térmica (Figura 2.6a). Em um experimento TL típico, um material é aquecido linearmente (Figura 2.6b) enquanto monitora a luz emitida em função da temperatura. A recombinação do portador de carga liberado com seu portador de carga oposto no centro de luminescência pode causar a emissão de luz.

Figura 2.6: a: Diagrama esquemático de TL onde a parábola corresponde ao estado eletrônico da armadilha. B: Rampa de temperatura típica para estimular a luminescência após carga em TL.



Fonte: adaptado de Yang *et al.*, 2024.

2.6.3 Dosímetro Fricke Gel

O Fricke gel contém íons ferrosos (Fe^{2+}), em soluções de sulfato ferroso, que estão dispersos em toda a matriz de gel. Após a irradiação, os íons ferrosos são convertidos em íons férricos (Fe^{3+}), com uma correspondente alteração nas propriedades paramagnéticas (Lazzaroni *et al.*, 2020). Observa-se uma mudança no parâmetro de relaxação T_1 de acordo com a distribuição da dose em profundidade, sendo possível realizar medições utilizando as propriedades de relaxação por ressonância magnética nuclear (RMN). Gore e colaboradores demonstraram que as alterações químicas no gel induzidas pela radiação podem ser

visualizadas por imagem por ressonância magnética (IRM), uma vez que a concentração de íons férricos afeta fortemente as propriedades magnéticas do dosímetro (Gore; Kang; Schulz, 1984).

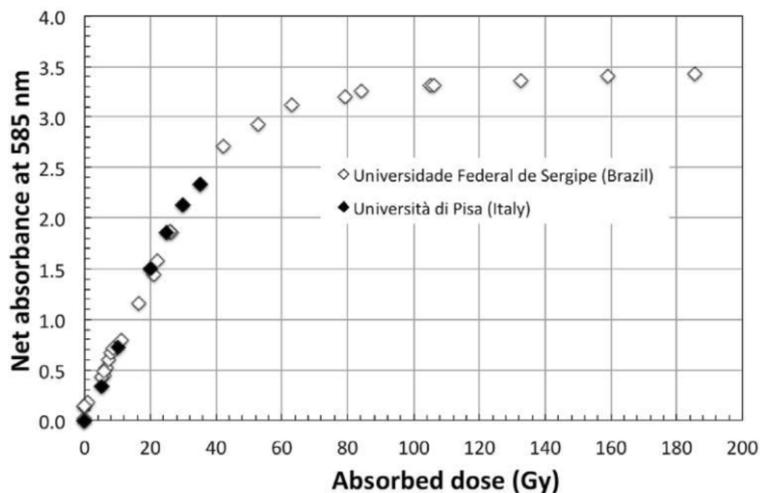
Gore e colaboradores tiveram a ideia inicial de criar dosímetros sensíveis à radiação ionizante, que também funcionam como objetos simuladores (phantoms), já que são confeccionados com um material tecido-equivalente. Para isso, eles utilizaram a solução Fricke 28, desenvolvida em 1927 por Fricke e Morse, dispersando-a em uma matriz gelatinosa (Fricke; Morse, 1927; Gore; Kang; Schulz., 1984).

No entanto, os íons férricos formados após a irradiação tendem a se difundir, espalhando-se pela matriz de gel no volume irradiado, uma vez que são partículas muito pequenas e altamente móveis. Isso acaba comprometendo o registro espacial da distribuição de dose (Baldock *et al*, 2001). Para minimizar a difusão, é necessário adicionar agentes quelantes à matriz de gel, como o alaranjado de xilenol (XO). Esse agente também atua como indicador dos íons férricos no volume irradiado, conferindo coloração à solução Fricke, que varia do alaranjado ao violeta, conforme o aumento da concentração de íons férricos (Appleby; Leghrouz, 1991). A partir desse aprimoramento, o dosímetro passou a ser conhecido como Fricke Xilenol Gel (FXG) e se tornou um dos mais utilizados e estudados.

No início dos anos 2000, Chu e colaboradores propuseram a dispersão da solução Fricke em uma matriz aquosa de álcool polivinílico (PVA, do inglês *polyvinyl alcohol*), um polímero sintético de estrutura química simples (Chu *et al.*, 2000). Um dos problemas desses géis é que muitos contêm espécies químicas altamente tóxicas. No entanto, já foram sintetizados géis de PVA, um polímero solúvel em água e não tóxico, que pode ser produzido por uma rota química utilizando glutaraldeído (GTA), uma molécula pequena e relativamente pouco tóxica. Suas reações de reticulação com o PVA ocorrem em temperatura ambiente, resultando em hidrogéis transparentes. Os géis Fricke sofrem oxidação espontânea e apresentam difusão de íons férricos durante e após a irradiação (Alves *et al.*, 2018). Para reduzir drasticamente essa difusão, pode-se utilizar o alaranjado de xilenol, uma molécula de grande porte que atua como agente quelante (D'Errico *et al*, 2017).

A partir da variação da absorvância da banda que surge como resultado da complexação do XO com o íon Fe^{3+} gerado pela radiação, é possível determinar a dose de radiação absorvida. A figura 2.7 apresenta a variação da absorção em 585 nm em função da dose depositada. Verifica-se uma linearidade até aproximadamente 30 Gy, a partir desta dose acontece a saturação do sinal. Esta saturação ocorre por conta que quase todas as moléculas de XO já se ligaram aos íons de Fe^{3+} .

Figura 2.7 – Variação da absorvância em 585 nm em função da dose absorvida. Observa-se uma linearidade até 30 Gy



Fonte: D'Errico *et al.*, 2017.

2.7 Aplicações na Medicina

Na área da medicina, a dosimetria de radiação é usada especialmente na radiologia para exames de radiografia, tomografia e radioterapia. A radiografia consiste no uso de um aparelho gerador de raios X (Figura 2.8), geralmente um tubo a vácuo com cátodo que dirige um feixe de elétrons para um ânodo, que coleta os elétrons e dissipa o calor gerado na colisão. Cerca de 1% da energia resultante é na forma de raios X, os 99% restantes se dissipam na forma de calor, por esse motivo comumente o ânodo é feito de tungstênio, pois este metal possui a maior temperatura de fusão (Van Griecken; Markowicz, 2001).

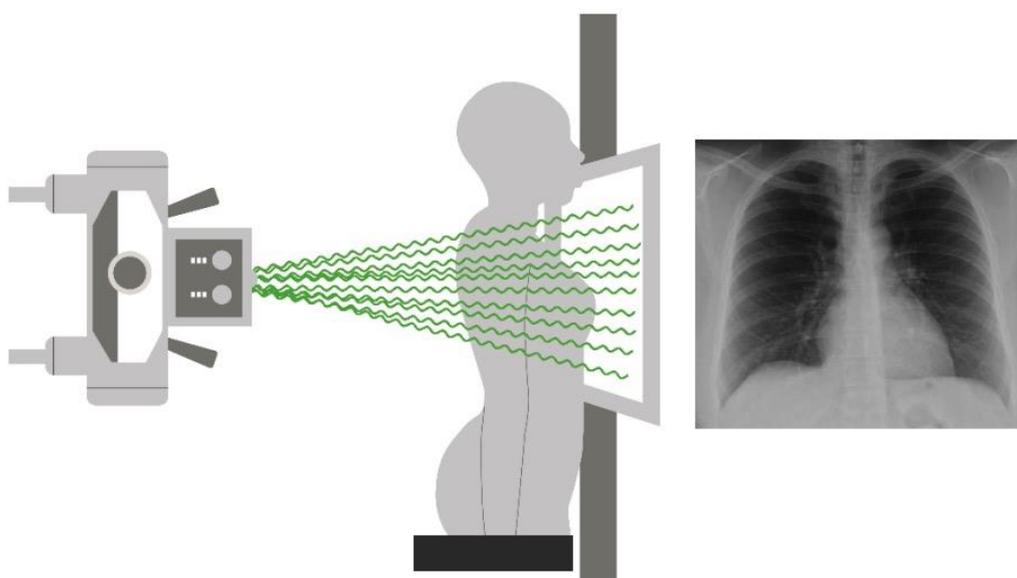
Figura 2.8 - Gerador de raios-x



Fonte: X-RIS, s.d.

Radiografias são usadas para examinar diferentes órgãos do paciente com base na capacidade de cada órgão de absorver os raios X, como a estrutura óssea, que devido a sua alta concentração de cálcio, elemento químico com número atômico maior do que os dos outros órgãos e os pulmões, como mostrado na figura 2.9. Isso reduz a quantidade de raios X que chegam no detector atrás do órgão, deixando-os claramente visíveis na radiografia.

Figura 2.9 - Esquema de uma radiografia



Fonte: Oitesh; Jones; Maza, 2023.

3 METODOLOGIA E MATERIAIS

Neste capítulo serão apresentadas os materiais e métodos usados neste trabalho. Apresentaremos uma breve discussão dos aminoácidos e da L-treonina, que foi o aminoácido estudado, além da obtenção, preparação e irradiação das amostras utilizadas. Discutiremos as bases da técnica de Espectroscopia de Infravermelho por Transformada Fourier (FTIR) e o modo de reflexão total atenuada (ATR).

3.1 Aminoácidos

Aminoácidos são compostos orgânicos que contém os grupos funcionais amina e ácido carboxílico. Existem mais de 500 aminoácidos, porém 22 α -aminoácidos são formadores de proteínas, chamados aminoácidos proteinogênicos, sendo que 2 desses não são formadores do código genético padrão. Para cada aminoácido existem dois isômeros especulares, um levógiro (L) e um destrógiro (D), sendo que somente a forma L existe nos organismos superiores (Vilela; Bacila; Tastaldi, 1976).

Os aminoácidos são normalmente classificados a partir da polaridade do seu grupo R. De acordo com essa classificação temos três grandes grupos de aminoácidos: 1) com grupo R apolar, 2) com grupo R polar não carregado e 3) com grupo R carregado. A divisão desses 20 aminoácidos em três grupos é um pouco arbitrária, visto que suas propriedades físico-químicas variam consideravelmente entre dois aminoácidos do mesmo grupo (Rodrigues Junior, 1999).

Uma propriedade importante dos aminoácidos que influencia na sua solubilidade é a propriedade ácido-base. Aminoácidos tem dois ou três grupos dissociáveis, um não carregado na forma ácida $^{-}COOH$ e um catiônico NH_3^{+} . Por possuírem esses grupos, eles podem se comportar como ácidos ou bases dependendo do pH da solução.

O pH para o qual não se tem carga líquida na molécula é conhecido como ponto isoeletrônico, pI. Neste ponto o aminoácido se encontra no estado *zwitterionic* (alemão para hermafrodita), ou seja, na forma de íons dipolares $^{+}H_3N \dots COO^{-}$. O ponto pI pode ser encontrado pela fórmula seguinte:

$$pI = \frac{1}{2} (pK1 + pK2),$$

onde pK1 e pK2 são os pontos onde a concentração da forma dissociáveis e *zwitterionic* são iguais. Para a treonina, temos que pK1 = 2,09 e pK2 = 9,10, resultando em pI = 5,595. (Rodrigues Junior, 1999)

A tabela 2 e a imagem 3.1 a seguir mostram, respectivamente, os aminoácidos proteinogênicos com seus valores de pK1 e pK2 listados e as suas estruturas químicas.

Tabela 2: Os 20 aminoácidos proteínogênicos formadores de código genético, com suas respectivas abreviações e pH de dissociação.

Aminoácido	pK1(α -COO ⁻)	pK2(NH ₃ ⁺)
Ácido Aspártico (Asp)	1,99	9,90
Ácido Glutâmico (Glu)	2,10	9,47
Alanina (Ala)	2,35	9,87
Arginina (Arg)	1,82	8,99
Asparagina (Asn)	2,14	8,72
Cisteína (Cys)	1,92	10,70
Fenilalanina (Phe)	2,20	9,31
Glicina (Gly)	2,35	9,78
Glutamina (Gln)	2,17	9,13
Histidina (His)	1,80	9,33
Isoleucina (Ile)	2,32	9,76
Leucina (Leu)	2,33	9,74
Lisina (Lys)	2,16	9,06
Metionina (Met)	2,13	9,28
Prolina (Pro)	1,95	10,64
Serina (Ser)	2,19	9,21
Treonina (Thr)	2,09	9,10
Tirosina (Tyr)	2,20	9,21
Triptofano (Trp)	2,46	9,46
Valina (Val)	2,39	9,74

Fonte: Rodrigues Junior, 1999

Figura 3.1 - Aminoácidos e suas classificações

Aminoácido				
Grupos R não-polares, alifáticos	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$ Glycine	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$ Alanine	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{CH} \\ \quad \\ \text{CH}_3 \quad \text{CH}_3 \end{array}$ Valine	
	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{CH} \\ \quad \\ \text{CH}_3 \quad \text{CH}_3 \end{array}$ Leucina	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{S} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$ Metionina	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{H} - \text{C} - \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$ Isoleucina	
	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{C} \\ / \quad \backslash \\ \text{H}_2\text{N}^+ \quad \text{CH}_2 \\ \quad \\ \text{H}_2\text{C} \quad \text{CH}_2 \end{array}$ Proline			
	Polar, grupos R não carregados	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{SH} \end{array}$ Cystine	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{CH}_2\text{OH} \end{array}$ Serine	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{C} \\ / \quad \backslash \\ \text{H}_2\text{N} \quad \text{O} \end{array}$ Asparagina
		$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{H} - \text{C} - \text{OH} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$ Threonine	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{C} \\ / \quad \backslash \\ \text{H}_2\text{N} \quad \text{O} \end{array}$ Glutamina	
Aminoácido				
Grupos de R de cobrança positiva	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{NH}_3^+ \end{array}$ Lysine	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{NH} \\ \\ \text{C} = \text{NH}_2^+ \\ \\ \text{NH}_2 \end{array}$ Arginina	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{C} - \text{NH}^+ \\ \quad \backslash \\ \quad \quad \text{CH} \\ \quad / \\ \text{C} - \text{NH}^+ \\ \\ \text{H} \end{array}$ Histidina	
Grupos R com carga negativa				
$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{COO}^- \end{array}$ Aspartato	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{COO}^- \end{array}$ Glutamato			
Grupos R não-polares, aromáticos				
$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{C}_6\text{H}_5 \end{array}$ Fenilalanina	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{C}_6\text{H}_4 \\ \\ \text{OH} \end{array}$ Tyrosine	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{C}_8\text{H}_6\text{N} \end{array}$ Tryptophan		

Fonte: Labxchange, 2020.

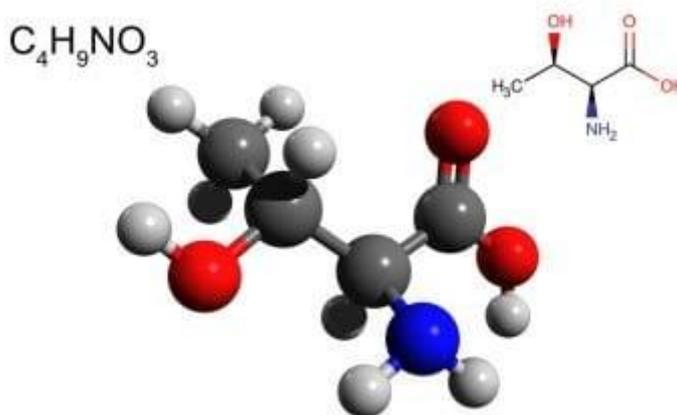
3.2 L-treonina

O aminoácido que foi utilizado neste trabalho foi a treonina, que é um aminoácido proteínogênico do grupo polar não carregado com dois carbonos simétricos e é essencial para humanos, sendo necessário estar presente na dieta. Foi descoberta em 1935 por William Cumming Rose, sendo o último dos aminoácidos proteínogênicos a ser descoberto. Sua estrutura foi determinada em 1950 (Shoemaker; Donohue; Shoemaker *et al*, 1950) e depois confirmada dois anos depois (Clark; Krc, 1952) usando difração de raios-X.

Como possui 2 carbonos assimétricos, isso resultará em 4 estereoisômeros. além do L e D já descritos também terá o L-allo e D-allo, porém a L-treonina se refere apenas a um desses estereoisômeros: o ácido (2S,3R) -2-amino-3-hidroxi-butanoico. Os cristais de L-Treonina são do grupo espacial $P2_12_12_1$, com quatro moléculas por célula unitária e parâmetros de rede: a

= 13,611 Å, b = 7,738 Å, c = 5,142 Å. A fórmula química, fórmula estrutural e modelo 3d bola e vara da L-treonina estão apresentadas na figura 3.2 a seguir.

Figura 3.2 - Fórmula química, fórmula estrutural e modelo 3D da L-treonina



Fonte: Depositphotos, s. d.

3.3 Espectroscopia FTIR

A técnica de espectroscopia de infravermelho com transformada de Fourier (sigla em inglês para Fourier Transformed Infrared - FTIR) possui um grande impacto na ciência, sendo útil para analisar materiais de origem orgânica e inorgânica. A espectroscopia de infravermelho costumava ser realizada verificando individualmente cada frequência da luz infravermelha para verificar se ela era absorvida pela amostra. Isso resultava num processo extremamente demorado e com grandes possibilidades para erros.

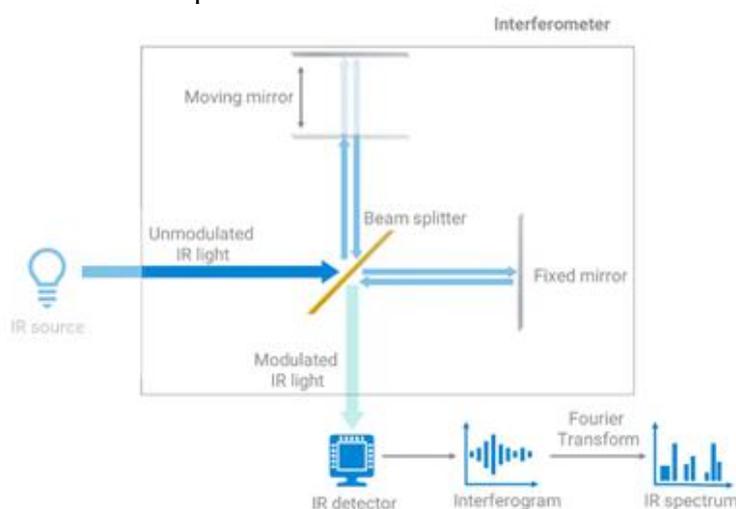
Essa técnica foi substituída pela FTIR, que permite verificar todos os comprimentos de onda da luz infravermelha simultaneamente usando um interferômetro. Essa técnica não é apenas muito mais rápida que a espectroscopia de infravermelho, mas também mais precisa, com uma melhor razão sinal-ruído. No entanto, essa técnica produz um conjunto de dados diferente do experimento tradicional de espectroscopia de infravermelho, portanto, uma operação matemática, chamada transformada de Fourier, é usada para converter os dados no espectro de infravermelho conhecido, obtido da espectroscopia de infravermelho.

O instrumento essencial do espectrômetro FTIR é um interferômetro de Michelson, que consiste em um espelho fixo, um espelho móvel e um divisor de feixe. Quando o feixe de infravermelho, proveniente de uma fonte, atinge o divisor de feixe, ele é dividido em duas metades. Metade do feixe é refletida no divisor de feixe para o espelho fixo, enquanto a outra metade passa pelo divisor de feixe em direção ao espelho móvel. Esses dois feixes são refletidos

nos espelhos fixo e móvel, respectivamente, e retornam ao divisor de feixe, onde se recombinam em um novo feixe que atravessa a amostra e é finalmente focalizado no detector.

A transformada de Fourier permite converter o sinal do detector de um domínio de tempo para o domínio de frequência (exibido em números de onda, cm^{-1}), o que resulta no que é conhecido como espectro FTIR. Todos os espectrômetros FTIR precisam de 3 componentes básicos: uma fonte que emita luz no infravermelho, um interferômetro que modifique a composição espectral da luz infravermelha em função do tempo e um detector que meça a intensidade da luz. Na figura 3.3 é apresentado o esquema dos componentes de um espectrômetro de FTIR.

Figura 3.3 - Representação esquemática de um interferômetro, peça central dos espectrômetros FTIR modernos



Fonte: Agilent, s. d.

Quando a luz infravermelha entra no interferômetro, um divisor de feixe divide a luz em dois feixes ópticos. O primeiro feixe é refletido por um espelho fixo, enquanto o segundo feixe é refletido por um espelho móvel. Este espelho se move constantemente para frente e para trás e, dependendo de sua posição, o segundo feixe percorre uma distância maior ou menor. Os dois feixes se encontram novamente no divisor de feixe, onde interferem.

Devido à mudança na distância de deslocamento do segundo feixe, a luz infravermelha resultante que sai do interferômetro tem uma distribuição de frequência em constante mudança. O detector registra esse interferograma, uma função da intensidade do sinal pelo tempo (resultante da mudança da posição do espelho), que é transformada, por aplicação da transformada de Fourier por um computador, em um espectro de frequência, uma função da intensidade do sinal por frequência/número de onda.

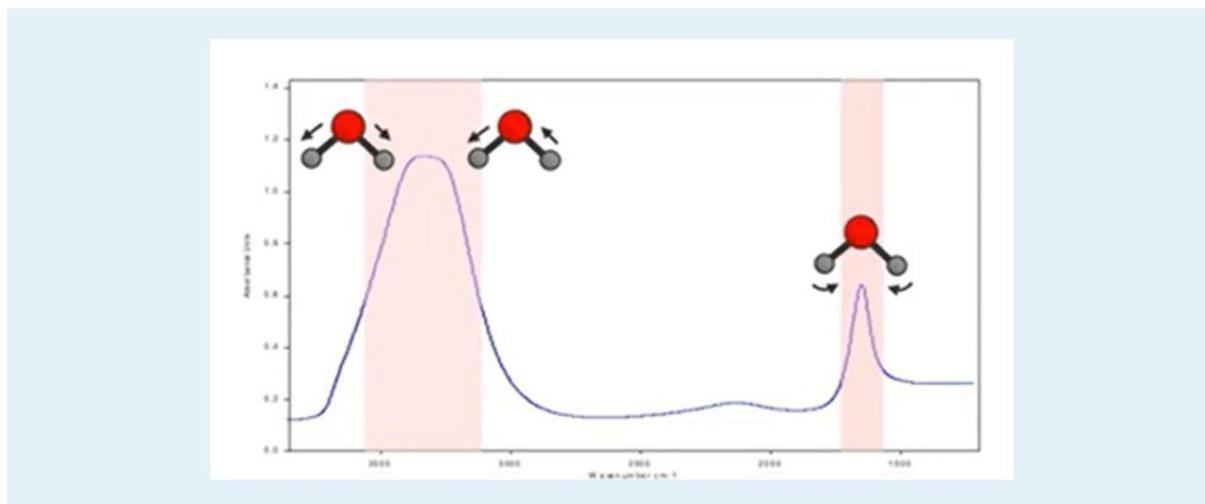
A amostra é exposta à radiação infravermelha, que possui comprimento de onda mais longo e frequência mais curta do que a luz visível e se encontra na região média do espectro eletromagnético, entre 4000 e 400 cm^{-1} . A forma como cada ligação molecular interage com a radiação é como pode ser definida a estrutura molecular da amostra, usando um espectrofotômetro para encontrar seu espectro de absorção.

O processo de varredura e análise resulta em um espectro que cria uma espécie de impressão digital molecular da amostra. Essa impressão digital apresenta os picos de absorção gerados por diferentes componentes da amostra, o que fornece informações diretas sobre a quantidade de material presente na amostra. Um pico específico de energia pode se mover com base em outros fatores químicos e matriciais (bem como pela forma como a energia incidente é introduzida).

Após a detecção da luz infravermelha, podemos plotar as informações obtidas pelo detector para criar o espectro de infravermelho. O espectro mostra quais frequências de radiação foram absorvidas pela amostra e, portanto, quais vibrações foram excitadas quando a radiação infravermelha passou pela amostra.

Por exemplo, para a amostra de água, o espectro mostra sinais nos números de onda correspondentes às frequências do estiramento simétrico e do estiramento antissimétrico, bem como a vibração de deformação das ligações O-H-O (ver figura 3.4 a seguir). Como cada espécie química terá vibrações em frequências diferentes, o espectro resultante de cada composto será único. Isso significa que a espectroscopia de infravermelho cria uma "impressão digital química" que pode ser usada para identificar e quantificar quase qualquer espécie química. Ao longo dos anos, informações sobre um vasto número de espécies químicas foram compiladas em bibliotecas espectrais, tornando a espectroscopia de infravermelho extremamente simples, mesmo para aqueles sem conhecimento da teoria por trás dela.

Figura 3.4 - Esquemática de como seria o espectro FTIR da água



Fonte: Agilent, s. d.

A molécula deverá demonstrar uma mudança no momento de dipolo elétrico na vibração das ligações em certas frequências para ser considerada ativa no infravermelho. As moléculas vibram basicamente de duas maneiras: dobramentos (deformações angulares) ou estiramentos (deformações axiais).

Dobramentos envolvem a variação do ângulo entre duas ligações químicas. Podem ser no plano, quando as vibrações ocorrem dentro do plano da molécula, ou fora do plano: as vibrações ocorrem perpendicularmente ao plano da molécula. Estiramentos envolvem a variação da distância internuclear entre os átomos de uma ligação. Poder ser simétricas, onde ambos os átomos se movem na mesma direção, ou assimétricas, onde se movem em direções opostas.

Atualmente, espectroscopia FTIR é usada de forma abrangente como uma ferramenta analítica rápida e acurada quantitativamente e qualitativamente para o estudo e caracterização de uma grande variedade de materiais, como moléculas orgânicas e vidros dopados com terras raras, além de aplicações, como o diagnóstico de cânceres de mama (Anagaw *et al*, 2025), tem se mostrado promissora do desenvolvimento de fármacos e no controle de qualidade e identificação de ingredientes farmacêuticos ativos (Rohman, 2012, Usman; Ghali; Selin, 2020). Além disso, a espectroscopia FTIR é usada para a análise da composição dos alimentos, aditivos e contaminantes (Dhakal *et al*, 2019).

A espectroscopia FT-IR pode ser usada para analisar amostras de tecido e fluidos corporais, ajudando a distinguir entre tecidos saudáveis e cancerosos com base nas diferenças na composição molecular (Andrei *et al*, 2015). A espectroscopia de FTIR pode fornecer informações sobre o tipo e o grau do tumor analisando a composição bioquímica dos tecidos

tumorais. Alterações nos espectros de FT-IR dos tecidos podem ajudar a avaliar a eficácia de um tratamento ao longo do tempo (Bunaciu; Hoang; Aboul-Enein, 2015).

3.4 Brometo de Potássio (KBr)

Quando as amostras analisadas estão em forma de pó, pode-se misturar o material de interesse com um outro que seja transparente na região do infravermelho que se pretende realizar o espectro e fazer uma pastilha com essa mistura. Assim, o espectro de FTIR da pastilha será do material de interesse. O material mais utilizado para este fim é o brometo de potássio (KBr) que é transparente no infravermelho e quimicamente inerte. O KBr pode ser prensado numa pastilha, permitindo que a luz infravermelha passe através dela e interaja com a amostra. A figura 3.5 mostra a foto de um pastilhador utilizado para a obtenção de pastilhas de KBr por pressão.

Figura 3.5 - Pastilhador utilizado para a obtenção de pastilhas de KBr

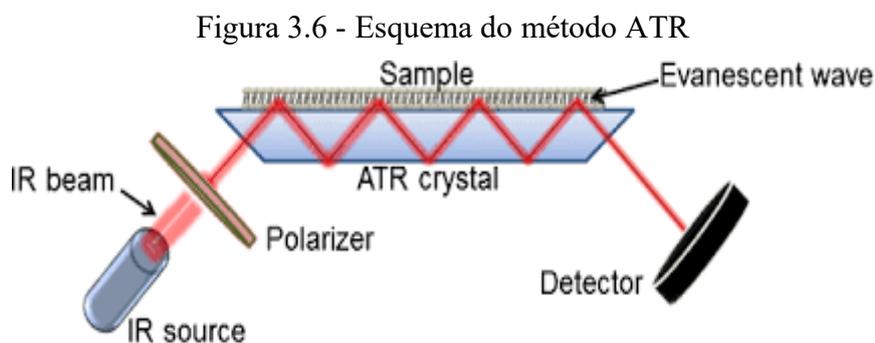


Fonte: arquivo do autor.

3.5 Reflexão Total Atenuada

No presente trabalho foi utilizado uma variação da técnica de FTIR, o método de reflexão total atenuada (Attenuated Total Reflection - ATR). O ATR oferece uma técnica de amostragem poderosa que praticamente elimina a preparação de amostras com líquidos e

sólidos, permitindo uma análise rápida das amostras, uma vez que neste método a radiação infravermelha não é transmitida através da amostra. Nesta técnica, uma pequena quantidade da amostra é colocada sobre um cristal que pode ser de diamante, ZnSe e Ge, no qual a radiação infravermelha está sendo guiada por reflexão interna total. Dependendo do equipamento, pode ocorrer uma ou várias reflexões internas, em cada uma das reflexões a radiação interage com a amostra através da onda evanescente. Após sair do cristal, o sinal é analisado na mesma maneira que no FTIR tradicional. Na figura 3.6 é apresentada uma representação do método ATR.



Fonte: Ausili; Sánchez; Gómez-Fernández, 2015.

Todas as análises foram realizadas utilizando o espectrômetro FT-IR Spectrum Two PerkinElmer (Figura 3.7), que foi utilizado tanto para a técnica de pastilhas de KBr e ATR seguindo o protocolo padrão de varredura, com uma resolução de 4 cm^{-1} e um número de 20 varreduras por amostras.

Figura 3.7 - Espectrômetro FTIR do Sergipe Tec que foi usado neste trabalho.



Fonte: arquivo do autor.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

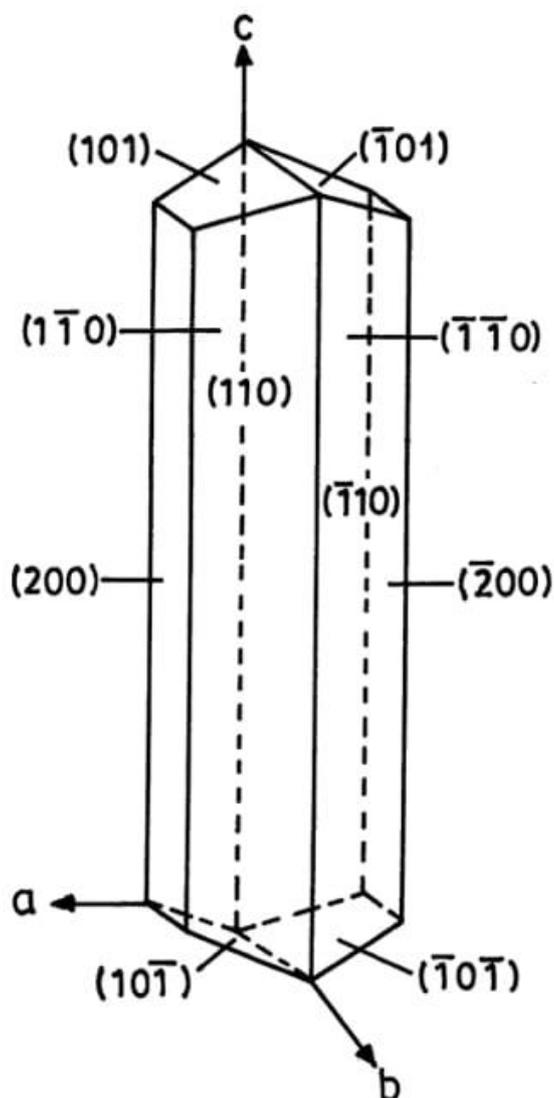
Aqui serão apresentados os resultados obtidos durante este estudo, como os cristais foram crescidos e irradiados e os gráficos com a discussão dos resultados obtidos.

4.1 Crescimento dos Cristais

Os cristais de L-treonina podem ser crescidos em solução aquosa por abaixamento de temperatura ou evaporação lenta do solvente (Rodrigues *et al.*, 2003) (Carvalho *et al.*, 1997). Neste trabalho usamos a técnica de evaporação lenta do solvente, que é água destilada. A solução saturada com L-treonina é preparada sob agitação a uma temperatura de aproximadamente 60 °C, para garantir que todo o material foi dissolvido e acrescentada um pouco de azida sódica, para evitar a formação de fungos na solução (Yokotani *et al.*, 1990) (Venkataramanan *et al.*, 1994). Após a completa dissolução do aminoácido, a solução é filtrada com papel filtro e colocada para descansar na temperatura de crescimento em um becker coberto com filme plástico com pequenos furos, que permitem a evaporação lenta do solvente. O primeiro passo para o crescimento de cristais de boa qualidade e volume é partir de boas sementes. Elas foram crescidas em solução por nucleação espontânea a 20° C. Uma vez obtida a semente, está é colocada em uma solução saturada e um cristal irá crescer a partir dela. O controle do nível de saturação da solução vai influenciar na qualidade do cristal crescido.

Os cristais de L-treonina apresentam uma estrutura ortorrômbica com simetria de grupo espacial, as dimensões da célula unitária são: $a = 13,611 \text{ \AA}$, $b = 7,738 \text{ \AA}$ e $c = 5,144 \text{ \AA}$, conforme determinado por análise de raios-X. (Rodrigues Junior *et al.*, 2003) na figura 4.1 é apresentado um esquema da morfologia do cristal de L-treonina.

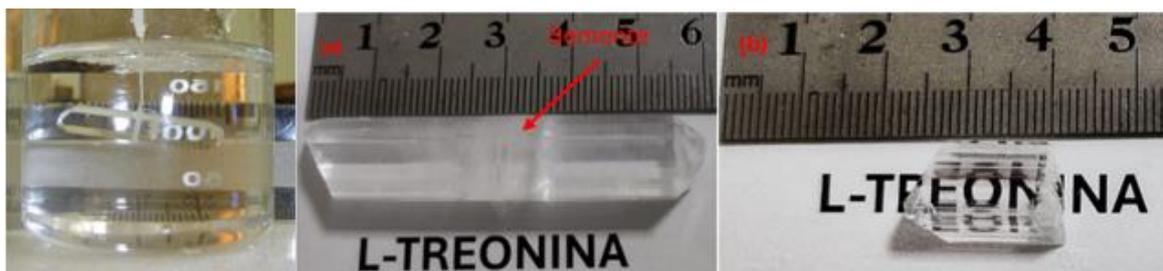
Figura 4.1 - Morfologia dos cristais de L-treonina



Fonte: adaptado de Linet, 2010.

Os cristais de L-treonina têm uma velocidade de crescimento maior na direção c , o que resulta em cristais alongados, na forma de agulhas. Assim, para aumentar a área transversal dos cristais, são feitos repetidos ciclos de crescimento, onde é retirada uma semente do cristal crescido e utilizada no ciclo seguinte. Cada ciclo dura de 3 a 4 semanas, o que torna o processo de obtenção de monocristais, com um volume apropriado para aplicações em dispositivos fotônicos, demorado. Na figura 3.4 apresentamos fotos de um cristal de L-treonina crescendo e de dois cristais crescidos por nós, na figura 3.4-a é possível perceber a semente que foi utilizada no centro do cristal.

Figura 4.2 – Cristal de L-treonina crescendo em solução aquosa. (a) Cristal crescido pelo método de evaporação lenta do solvente. No centro do cristal é possível distinguir a semente utilizada. (b) Monocristal de L-treonina



Fonte: arquivo do autor.

Neste trabalho, como utilizaremos as técnicas de pastilha de KBr e ATR, não são necessários cristais de boa qualidade óptica, como o da figura 4.2-b, o que permite que obtenhamos os cristais em um tempo muito mais curto, aproximadamente duas semanas, crescendo os cristais em uma estufa a 35 °C. Uma vez crescidos, os cristais são macerados até se obter um pó, formado por microcristais de diversos tamanhos. Para as medidas de FTIR as pastilhas de KBr foram feitas com a mesma quantidade de KBr e L-treonina, já para o método de ATR, o pó obtido foi dividido em quantidades iguais de massa em potes de plástico, figura 4.3.

Figura 4.3 – Amostras de L-treonina separadas com a mesma massa para serem irradiadas nas mesmas condições, mantendo uma amostra de referência sem irradiação



Fonte: arquivo do autor.

4.2 Irradiação das Amostras

As amostras foram irradiadas no laboratório de radiações do Departamento de Física da Universidade Federal de Sergipe, usando um irradiador de fótons gama chamado SOPHIA (Figura 4.4). O irradiador SOPHIA possui 12 sementes com isótopo de céscio-137 arranjadas em três gavetas, com um número diferente de sementes por gaveta que proporciona diferentes taxas de dose. Neste trabalho foi utilizada a gaveta com oito sementes que fornece uma taxa de

dose de 2,006 Gy/h. As amostras foram arrumadas no suporte da gaveta, figura 4.5, sempre na mesma posição, para garantir que foram irradiadas na mesma taxa e distribuição de dose.

Figura 4.4 - Foto do irradiador SOPHIA



Fonte: arquivo do autor

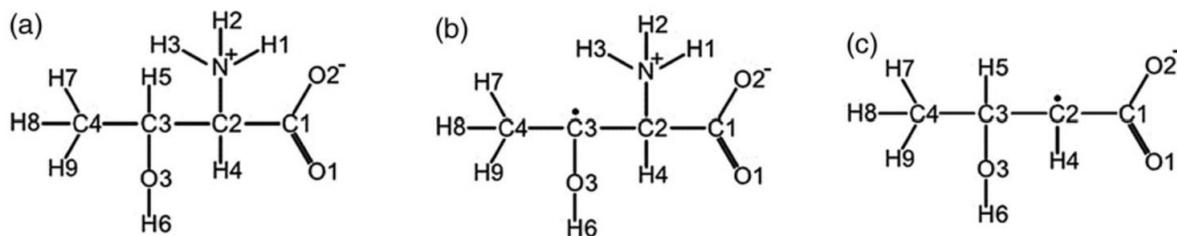
Figura 4.5 - Foto da parte interna de uma das gavetas do irradiador SOPHIA que comporta as fontes radioativas de Césio-137



Fonte: arquivo do autor

Quando submetida à radiação ionizante, a L-treonina sofre a ruptura de ligações químicas, o que resulta em radicais estáveis. Estes radicais são distribuídos pelo cristal conforme acontece a interação com a radiação. É razoável supor que o maior número de radicais é formado nas primeiras camadas do cristal, abaixo a superfície, uma vez que é a região com maior interação com a radiação. Na literatura, a partir de estudos com as técnicas de Espectroscopia de Ressonância Paramagnética Eletrônica (EPR) e Ressonância Eletro-Nuclear Dupla (ENDOR) são atribuídos dois principais radicais formados pela irradiação da L-treonina ($\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}(\text{NH}_3^+)\text{COO}^-$): $\text{CH}_3\dot{\text{C}}(\text{OH})\text{CH}(\text{NH}_3^+)\text{COO}^-$ e $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\dot{\text{C}}\text{COO}^-$, sendo o último mais provável (Gauthier Vanhaelewyn *et al.*, 2007). Na figura 4.6 é apresentada a fórmula química da L-treonina e os dois radicais formados pela radiação.

Figura 4.6 – Representação da fórmula química da L-treonina (a) e dos dois radicais formados pela interação da radiação com os cristais (b) e (c). O radical (c) é o mais provável



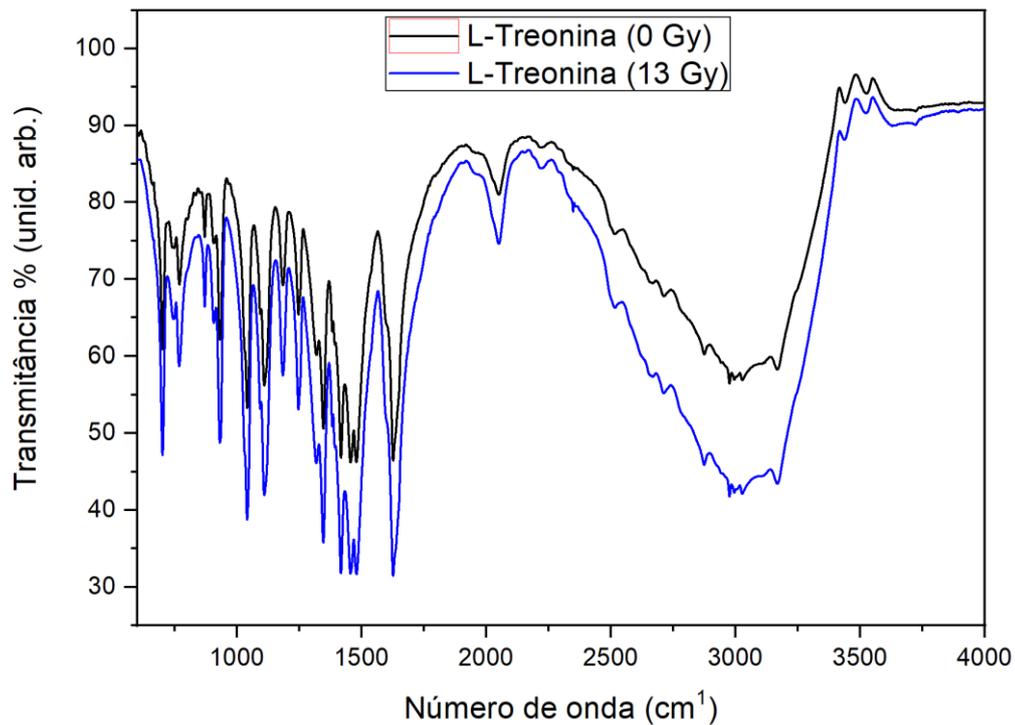
Fonte: adaptado de Gauthier Vanhaelewyn *et al.*, 2007.

4.3 Medidas de FTIR – KBr

Foram realizadas medidas de FTIR em pastilhas de KBr/L-treonina em doses variando de 1,0 a 35 Gy. Na Figura 4.7 é apresentada o espectro de FTIR obtido para uma amostra não irradiada (0 Gy) e uma irradiada com uma dose de 13 Gy, no intervalo de 600 a 4000 cm^{-1} . Para ambas as amostras, verificamos uma concordância com o espectro apresentado por *A. Pawlukoje' et al.* (2001) (ver a figura 4.8). Também é possível verificar que os espectros apresentam diferenças na relação entre bandas, como em torno de 1500 e 3500 cm^{-1} .

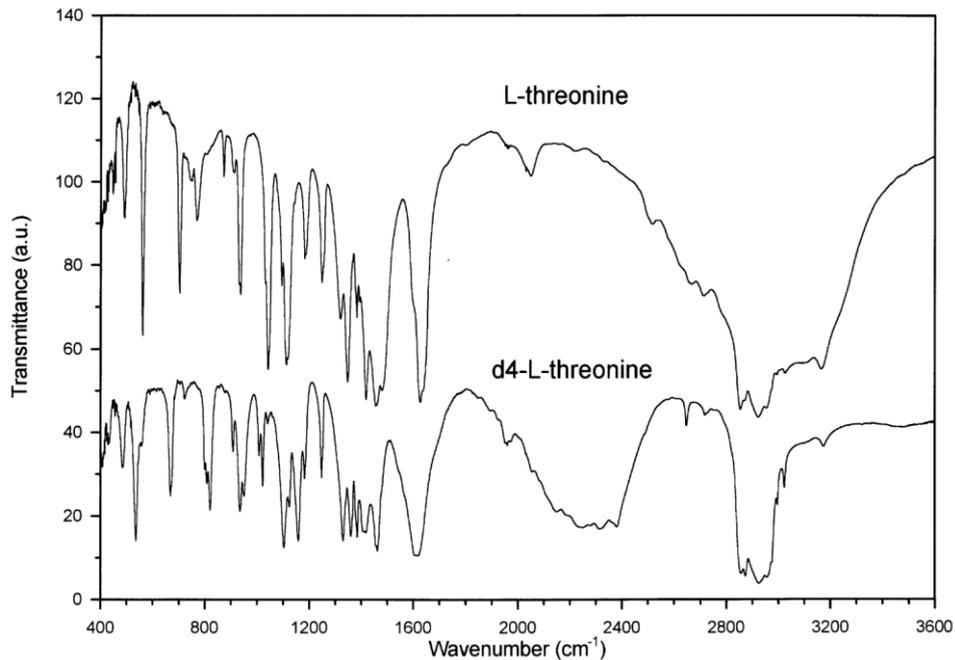
Fazer uma análise direta entre os espectros das amostras em diferentes doses não é possível, pois pequenas variações entre as amostras e os parâmetros do equipamento, resulta em diferenças razoáveis nos espectros, como a amplitude e deslocamento dos espectros. Para contornar esse problema, fizemos a normalização dos espectros em uma região que não sofre alteração pela radiação e procuramos relação entre bandas relacionadas aos radicais criados. Mesmo fazendo diversas comparações, não encontramos uma relação que variasse com a dose aplicada de maneira coerente.

Figura 4.7 – Espectro de FTIR de L-treonina, usando pastilhas de KBr, sem irradiação (Preto) e irradiada com uma dose de 13 Gy



Fonte: elaboração própria

Figura 4.8 – Espectros de FTIR de cristais de L-Treonina e DL-Treonina, verifica-se a semelhança com os espectros da figura 4.7

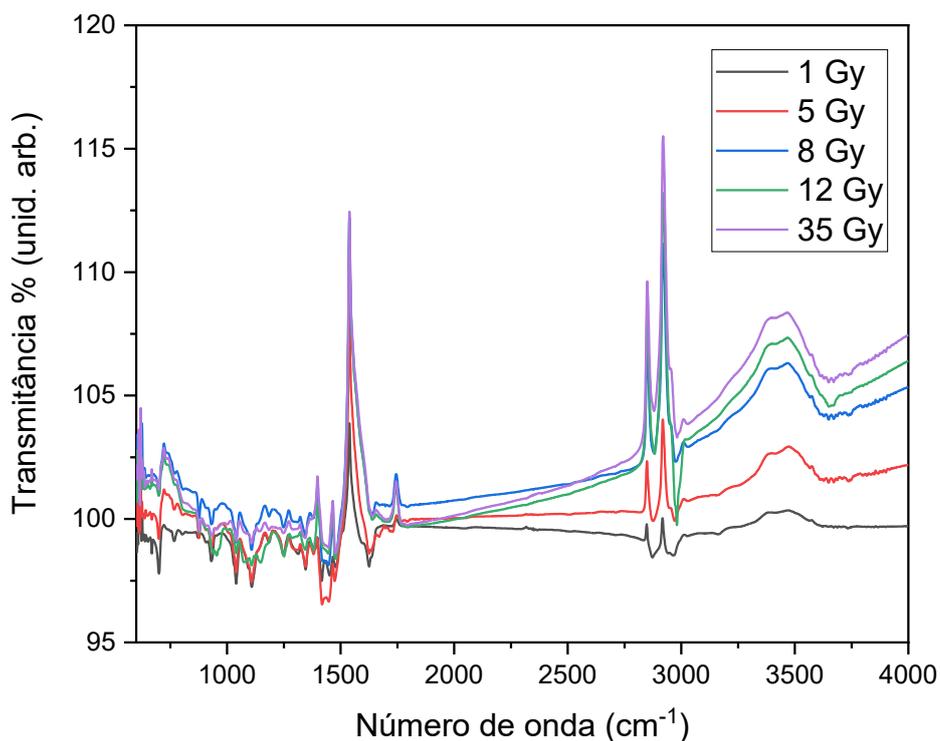


Fonte: A. Pawlukojc' *et al*, 2001.

4.4 Medidas de FTIR – ATR

Uma vez que a radiação, principalmente em baixas doses, interage mais fortemente com as camadas mais superficiais do cristal, foram realizadas medidas com a técnica de ATR, que mede a interação da onda evanescente resultante da reflexão interna total no cristal do equipamento. Nesta técnica foram realizadas irradiações em amostras iguais, figura 4.3, nas doses: 1, 5, 12 e 35 Gy. A figura 4.9 apresenta os espectros de FTIR-ATR das amostras.

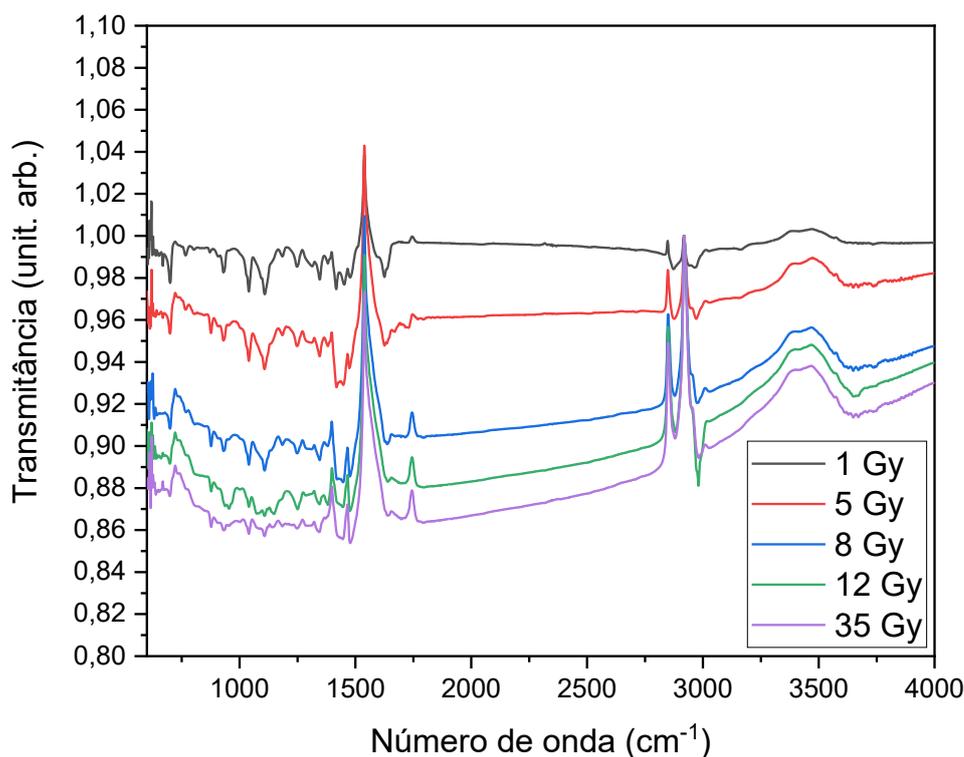
Figura 4.9 - Gráfico da transmitância pelo número de onda das amostras irradiadas em relação a referência



Fonte: elaboração própria

Novamente não é possível fazer uma comparação direta entre os espectros, uma vez que a distribuição da amostra sobre o cristal do acessório de ATR não é a mesma para cada amostra. Para resolver esse problema utilizamos o valor da transmitância em 2920 cm^{-1} em cada espectro como referência e fizemos a normalização por ele. Na figura 4.10 são apresentados os espectros já normalizados.

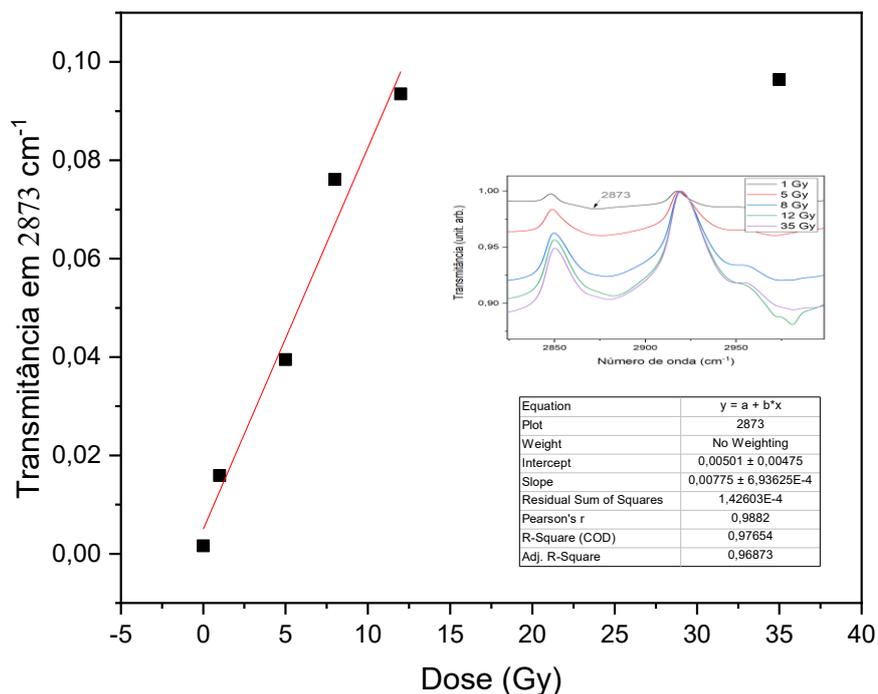
Figura 4.10 - Gráfico da transmitância pelo número de onda das amostras irradiadas em relação a referência.



Fonte: elaboração própria.

É possível observar que a relação entre as bandas muda de um espectro para outro, dependendo da dose. Também é observado que após a normalização a posição em torno de 1540 está acima de 1 para as doses mais baixas, isto pode acontecer com a técnica de ATR, onde a distribuição e o contato da amostra com o cristal não é uniforme. Analisando inicialmente a banda em 2873 cm⁻¹ e fazendo o gráfico da transmissância em função da dose temos uma região de linearidade que vai até aproximadamente 12 Gy, onde ocorre uma saturação. Na figura 4.11 é apresentada a variação da banda centrada em 2873 cm⁻¹. Esta banda está relacionada ao estiramento do grupo metila (CH₃) (A. Pawlukojc' *et al*, 2001).

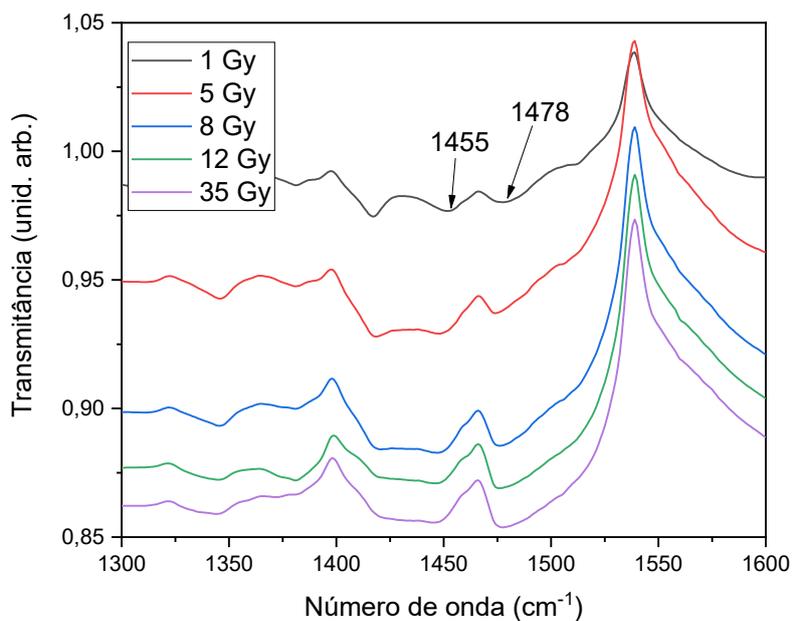
Figura 4.11 – Variação da transmissância em 2873 cm⁻¹. No detalhe, dados do ajuste linear até a dose de 12 Gy.



Fonte: elaboração própria.

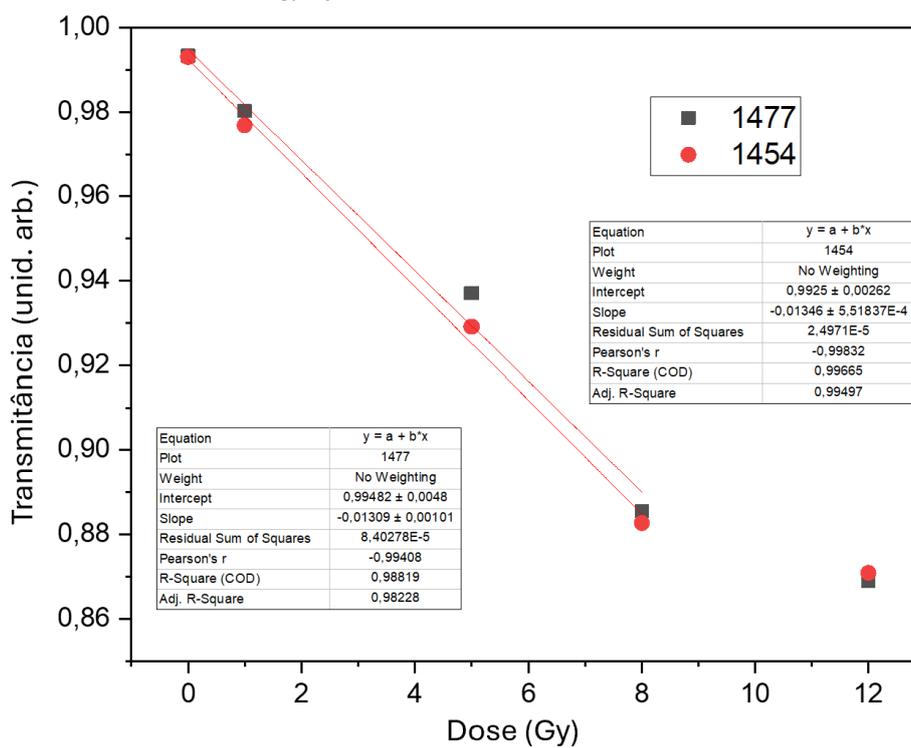
Analisando as bandas relacionadas com a torção do grupo CH_3 por volta de 1455 e 1478 cm^{-1} (A. Pawlukojc' *et al.*) verifica-se que a relação entre as bandas também se altera com a dose, figura 4.12. Realizamos a análise neste gráfico plotado a transmitância normalizada em função da dose para cada banda e em seguida realizamos o ajuste linear para cada conjunto de dados até a dose de 12 Gy. Novamente, verifica-se uma boa linearidade para doses menores e uma saturação a partir de 12 Gy. A figura 4.13 apresenta os resultados obtidos.

Figura 4.12 – Transmitância normalizada na região de 1300 a 1600 cm^{-1} , com destaque às bandas de flexão do grupo CH_3 .



Fonte: elaboração própria

Figura 4.13 – Variação da transmitância normalizada das bandas relacionadas à flexão do grupo CH_3 em 1478 e 1455 cm^{-1} .



Fonte: elaboração própria

5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

No presente trabalho realizamos o crescimento de cristais de L-treonina que foram macerados e irradiados com diferentes doses de raios gamas. Após a irradiação foi realizado o estudo das amostras utilizando a espectroscopia de FTIR. Foram realizadas medidas através do uso de pastilhas de KBr, onde uma pequena proporção de L-treonina foi misturada ao KBr para forma as pastilhas. O KBr é o material amplamente utilizado neste tipo de estudo por ser transparente no infravermelho. Foram obtidos os espectros para as amostras com doses variando de zero a 35 Gy. Os espectros obtidos têm concordância com os de cristais de L-treonina reportados na literatura, porém não foi possível determinar nenhuma mudança com um comportamento linear com a dose.

Como as camadas mais superficiais dos cristais é que interagem mais fortemente com a radiação, foram realizadas mais uma série de medidas de FTIR, mas utilizando a técnica de ATR, onde a radiação infravermelha interage com a amostra através da onda evanescente na reflexão interna total. Como a onda evanescente tem uma pequena penetração na amostra, as camadas superficiais é que contribui fortemente para o espectro. Para realizar o estudo, inicialmente os espectros foram normalizados e analisadas as bandas relacionadas aos modos de vibração do grupo metila (CH_3), o estiramento em torno 2873 cm^{-1} e a toção em torno de 1455 e 1478 cm^{-1} . Em todas as análises foi possível verificar uma resposta linear até a dose de 12 Gy, quando ocorre uma saturação. Desta forma, foi desenvolvida uma nova metodologia, utilizando a técnica de ATR, para dosimetria de radiação gama em baixas doses, que estão na mesma faixa das utilizadas em radioterapia.

Como perspectivas futuras, devem ser realizados um estudo mais detalhado, com doses entre 8 e 15 Gy para determinar o ponto que inicia a saturação do sinal de FTIR nas bandas estudadas. Também devem ser analisadas outras bandas, relacionadas com outros grupos funcionais que podem ter respostas iguais ou melhores das já estudadas. Também pretendemos estender esta metodologia para outros aminoácidos, como a L- alanina que já é utilizada na dosimetria, utilizando a técnica de EPR. Serão empregadas outras radiações ionizantes, tais como Raios X e partículas alfa. Enfim, os desdobramentos deste trabalho podem levar ao desenvolvimento de uma nova metodologia. [10]

REFERÊNCIAS

A. V. S. Alves, W. S. de Almeida, E. M. Sussuchi, L. Lazzeri, F. d'Errico, S. O. de Souza. Investigation of chelating agents/ligands for Fricke gel dosimeters. *Radiat. Phys. Chem.* 2018, 150, 151.

A. Yokotani, T. Sasaki, A. Fujioka, S. Nakai, C. Yamanaka, J. of Crystal Growth, Vol 99. 815-819 (1990)

AGILENT. Molecular spectroscopy. **Agilent**. s. d. Disponível em: <https://www.agilent.com/en/support/molecular-spectroscopy/ftir-spectroscopy/ftir-spectroscopy-basics-faqs>. Acesso em: 18 jun. 2025.

ANAGAW, Y. K. *et al.* Application of Fourier transform infrared spectroscopy on breast cancer diagnosis combined with multiple algorithms: a systematic review. **Photodiagnosis and Photodynamic Therapy**, v. 53, 2025.

ANDREI, A. *et al.* Cancer diagnosis by FT-IR Spectrophotometry. **Rev. Roum. Chim**, v. 60, n. 5-6, p. 415-426, 2015.

APPLEBY, A.; LEGHROUZ, A. Imaging of radiation dose by visible color development in ferrous-agarose-xylene orange gels. **Medical physics**, v. 18, n. 2, p. 309-312, 1991.

AUSILI, Alessio; SÁNCHEZ, Marina; GÓMEZ-FERNÁNDEZ, Juan C. Attenuated total reflectance infrared spectroscopy: A powerful method for the simultaneous study of structure and spatial orientation of lipids and membrane proteins. **Biomedical Spectroscopy and Imaging**, v. 4, n. 2, p. 159-170, 2015.

BALDOCK, C. *et al.* Experimental determination of the diffusion coefficient in two-dimensions in ferrous sulphate gels using the finite element method. **Australasian Physics & Engineering Sciences in Medicine**, v. 24, p. 19-30, 2001.

BUNACIU, A.; HOANG, V. D.; ABOUL-ENEIN, H. Y. Applications of FT-IR spectrophotometry in cancer diagnostics. **Critical reviews in analytical chemistry**, v. 45, n. 2, p. 156-165, 2015.

CHU K. C. *et al.* Polyvinyl alcohol-Fricke hydrogel and cryogel: two new gel dosimetry systems with low Fe³⁺ diffusion. **Physics in Medicine & Biology**, v. 45, n. 4, p. 955, 2000.

CLARK, R. L.; KRC, John. Crystallographic Data. 59 L3-Threonine (Threo- α -amino- β -hydroxy-n-butyric Acid). **Analytical Chemistry**, v. 24, n. 8, p. 1378-1379, 1952.

DATA. Paul Villard (1860-1934). **Data**. s.d. Disponível em: <https://data.bnf.fr/fr/ark:/12148/cb13011462p>, em 12 abr. 2025.

DE OLIVEIRA, G. S. B. **Diagnóstico do câncer de mama e o ensino de tópicos de física moderna**. 2019. Dissertação (Mestrado Profissional em ensino de física). São Cristóvão. Universidade Federal de Sergipe, 2019.

DEPOSITPHOTOS. Fórmula química, fórmula estrutural e modelo 3D da L-treonina. **Depositphotos**. s. d. Disponível em: <https://depositphotos.com/br/photo/chemical-formula-structural-formula-ball-stick-model-threonine-essential-amino-445740800.html>. Acesso em: 10 maio 2025.

D'ERRICO, F. *et al.* Novel GTA-PVA Fricke gels for three-dimensional dose mapping in radiotherapy. **Radiation Measurements**, v. 106, p. 612-617, 2017.

DHAKAL; S. *et al.* Detection of additives and chemical contaminants in turmeric powder using FT-IR spectroscopy. **Foods**, v. 8, n. 5, p. 143, 2019.

FILIPEV, I. *et al.* Review on High Spatial Resolution Dosimetry with Pixelated Semiconductor Detectors for Radiation Therapy. **Radiation Measurements**, Vol. 177. 2024

FRICKE H.; MORSE S. The chemical action of roentgen rays on dilute ferrous sulfate solutions as a measure of radiation dose. **American Journal of Roentgenology Radium Therapy and Nuclear Medicine**, n. 18, p. 430-432, 1927.

GAUTHIER VANHAELEWYN, C. *et al.* Radiation-induced radicals in single crystals of amino acids: a paramagnetic resonance study. **Radiation Physics and Chemistry**, v. 76, p. 1420–1424, 2007.

GORE J.C.; KANG Y.S.; SCHULZ R.J. Measurement of radiation dose distributions by nuclear magnetic resonance (NMR) imaging. **Physics in Medicine & Biology**, v. 29, p. 1189-1197, 1984.

HALLIDAY, D.; RESNICK, R.; WALKER, J. *Fundamentos de Física*, v. 4., 10 ed. Rio de Janeiro: LTC, 2016.

HENRIQUES, L. M. S. **Caracterização de Objeto Simulador Antropomórfico de Tórax para Medidas de Dose em Feixes de Radiologia**. 2012. Dissertação (Mestrado em física) – Universidade Federal de Sergipe. São Cristóvão. 2012.

J. F. Carvalho, A. C. Hernandez, F. D. Nunes, L. B. O. A. de Moraes, L. Misoguti, S. C. Zilio. *J. of Crystal Growth*, Vol 173. 487-491 (1997)

LABXCHANGE. 3.4 Proteínas. **Labxchange**. 20 jan. 2020. Disponível em: <https://www.labxchange.org/library/pathway/lx-pathway:58455b16-7059-4ae6-a575-6e865e38a713/items/lb:LabXchange:9f03b9fa.html:1/53542>. Acesso em: 06 jun. 2025.

L'ANNUNZIATA, M. F. **Radioactivity**: introduction and history. Amsterdam, Netherlands: Elsevier BV, 2007

LINET, J. M., DAS, S. J. Investigations on growth morphology, bulk growth and crystalline perfection of L-threonine, an organic nonlinear optical material. Elsevier, 2010.

LOVETT, D. R. **Tensor Properties of Crystal**. Bristol: IOP Publishing Ltd, 1990.

OITESH, S.; JONES, L.; MAZA, E. X-rays. **Lecturio**. 29 mar. 2023. Disponível em: <https://www.lecturio.com/concepts/x-rays/>. Acesso em: 28 abr. 2025.

OKUNO, E. **Radiação**: efeitos, riscos e benefícios. São Paulo: Oficina de Textos, 2018.

PAWLUKOJC, A. *et al.* Neutron scattering, infra-red, Raman spectroscopy and ab initio study of L-threonine. **Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy**, v. 57, p. 2513–2523, 2001.

ROCHA, R. V. S. **Dosimetria Fricke Gel na caracterização de feixes de elétrons para radioterapia intraoperatória (IOERT) de mama**. 2018. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Física) – Universidade Federal de Sergipe, São Cristóvão, 2018.

RODRIGUES JUNIOR, J. J. **Crescimento e Caracterização Óptica de Cristais de L-Treonina e L-Lisina.HCl**. 1999. Dissertação (Mestrado em Física) – Instituto De Física de São Carlos, São Paulo, 1999.

RODRIGUES JUNIOR, J. J. *et al.* Optical properties of L-threonine crystals. **Optical Materials**, v. 22, n. 3, p. 235-240, 2003.

ROHMAN, Abdul. Application of fourier transform infrared spectroscopy for quality control of pharmaceutical products: A review. **Indonesian Journal of Pharmacy**, v. 23, n. 1, 2012.

S. Lazzaroni, G. M. Liosi, M. Mariani, D. Dondi, *Radiat. Phys. Chem.* 2020, 171, 108733.

SEED – SECRETARIA DA EDUCAÇÃO DO PARANÁ. Galeria de imagens: eletromagnetismo. **SEED**. s.d. Disponível em: <http://www.fisica.seed.pr.gov.br/modules/galeria/detalhe.php?foto=118&evento=2> em 30 abr. 2025.

SHOEMAKER, D. P.; DONOHUE, J.; SCHOEMAKER, V., B. Corey. Growth and Characterization of Urea Adduct with m-Nitrobenzoic Acid, m-Nitroaniline, and p-Xylene Mixtures. **J. Am. Chem. Soc.**, v. 72, p. 2329-2349, 1950.

SOLÉ, J. G.; BAUSA, L. E.; JAQUE, D.; *An Introduction to the Optical Spectroscopy of Inorganic Solids*. England: John Wiley & Sons, 2005

SOUZA, S. O. de *et al.* Novos materiais dosimétricos para aplicações em física médica. **Revista Brasileira de Física Médica**, v. 13, n. 1, p. 35–43, 2019.

USA - UNITED STATES OF AMERICA. Office of Environment, Health, Safety & Security. **The DOE Ionizing Radiation Dose Ranges Chart. Office of Environment, Health, Safety and Security**. Washington: DOE, 2018. Disponível em: <https://www.energy.gov/ehss/articles/doe-ionizing-radiation-dose-ranges-charts>. Acessado em 09 maio 2025.

USMAN A.G.; GHALI, U.M.; SELIN, I. Applications of miniaturized and portable near infrared (NIR), Fourier transform infrared (FT-IR) and Raman spectrometers for the inspection and control of pharmaceutical products. **Journal of Faculty of Pharmacy of Ankara University**, v. 44, n. 1, p. 188-203, 2020.

V. Venkataramaman, G. Dhanaraj, H. L. Bhat, J. of Crystal Growth, Vol 140, 336-342 (1994)

VALENTIN, J (ed.). **Publication 103: The 2007 Recommendations of the International Commission on Radiological Protection**. ICRP: Elsevier, 2007.

VAN GRIECKEN, R.; MARKOWICZ, A. **Handbook of X-Ray Spectrometry**. 2. ed. Boca Roton: CRC Press, 2001.

VILELA, G. G.; BACILA, M.; TASTALDI, H. **Bioquímica**. 3. ed. São Paulo: EDUSP, 1976.

X-RIS – X-RAY IMAGE SOLUTIONS. X-ray sources. **X-RIS**. s. d. Disponível em: <https://xris.eu/>. Acesso em: 28 abr. 2025.

YANG, Z. *et al.* Passive dosimeters for radiation dosimetry: materials, mechanisms, and applications. **Advanced Functional Materials**, v. 34, 2024.