UNIVERSIDADE ESTADUAL DE PONTA GROSSA SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM CIÊNCIAS/FÍSICA

LOHANE TECH

CARACTERIZAÇÃO DE SOLOS POUCO DESENVOLVIDOS COM FOCO NA FLUORESCÊNCIA DE RAIOS X E PARÂMETROS DE INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO

PONTA GROSSA

2022

LOHANE TECH

CARACTERIZAÇÃO DE SOLOS POUCOS DESENVOLVIDOS COM FOCO NA FLUORESCÊNCIA DE RAIOS X E PARÂMETROS DE INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO

Tese apresentada ao Programa de Pós Graduação em Ciências, área de concentração Física, da Universidade Estadual de Ponta Grossa, como requisito para obtenção do título de doutora em Ciências.

Orientador: Prof. Dr. Luiz Fernando Pires.

Co-orientador: Prof. Dr. André Mauricio Brinatti.

PONTA GROSSA 2022



Ficha catalogràfica elaborada por Maria Luzia Fernandes Bertholino dos Santos- CRB9/986

TERMO DE APROVAÇÃO

Lohane Tech

"CARACTERIZAÇÃO DE SOLOS POUCO DESENVOLVIDOS COM FOCO NA FLUORESCÊNCIA DE RAIOS X E PARÂMETROS DE INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO"

Tese aprovada como requisito parcial para obtenção no grau de Doutor no Programa de Pós-Graduação em Ciências – Física da Universidade Estadual de Ponta Grossa, pela seguinte banca examinadora.

Orientador:

line

Dr. Luiz Fernando Pires - UEPG- Presidente

Dr. Fábio Augusto Meira Cássaro- UEPG - Titular

Dr. Isonel Sandino Meneguzzo- UEPG - Titular

Fabie L. Melguides Dr. Fábio Luiz Melquiades- UEL- Titular

Dr. Valdirlei Fernandes Freitas - UNICENTRO - Titular

Ponta Grossa, 14 de setembro de 2022.

Dedico este trabalho a todos que não desistiram.

AGRADECIMENTOS

À deusa, minha divindade, por me fazer chorar em momentos que foram necessários para o alívio do peito por toda a pressão que fui capaz de sobreviver.

Aos meus pais, meu pai maravilhoso que sempre me incentivou aos estudos, que foi meu abrigo quando eu não tinha mais para onde correr. Minha mãe, igualmente maravilhosa, que também sempre me incentivou a ser melhor do que ontem, que também sempre me acolheu de braços abertos a todas as conquistas que decidi fazer.

Aos meus irmãos, por serem duas *azias* que jamais me viraram as costas. Por todos os momentos descontraídos de risadas, de *zoeira* um com o outro e pelo companheirismo dos meus dois amores, sem vocês eu não seria eu. E também não passaria por alguns estresses a mais. Aos meus cunhados, obrigada por existirem, a deusa foi muita generosa quando colocou vocês no meu caminho e dos meus irmãos.

Aos Professores do FASCA, Dr. Luiz Fernando Pires, Dr. André Maurício Brinatti e Dr. Sérgio da Costa Saab, obrigada pela dedicação e pelos ensinamentos passados a mim com maestria e perfeição. Se não atingi os objetivos e expectativas dos Professores, em momento algum isso foi uma falha de vocês, mas minha.

Às Professoras Dr. Vládia e Dr. Renata e ao Pequi Espeleogrupo, sem elas este trabalho jamais seria possível. Dois anjos que foram colocados na minha caminhada que me ensinaram os conceitos agronômicos básicos (e não tão básicos assim) com tanta paciência e carinho. Nunca serei capaz de expressar minha eterna gratidão à vocês!

Ao meu cachorrinho Hércoles, por todas as vezes que rolou na terra depois de banho tomado, por todas as vezes que ameaçou avançar em mim quando falava que ia tomar banho e pelos pulos de alegria quando o assunto era passear. À minha cadelinha Topa, por ser a *javalizinha piduncha* de petiscos mais fofa que já entrou na minha vida. A todos que estão lendo isso, não compre, adote.

À minha prima Mayara, mulher incrível e a única da minha família que ainda fala comigo e discorda de todo o genocídio gerado em nosso país, amo-a demais e obrigada pelas tardes de descontração na piscina. À minha psicóloga Vanessa Hecavei, obrigada por ser minha guia espiritual nesta jornada, sem terapia não teria tese.

Aos meus amigos incríveis, Layara, minha comadre por aguentar todas as vezes que eu ficava depressiva e a vida cobrava o seu preco, e pelos momentos de descontração e companheirismo que não se apagaram em 10 anos de amizade. Ao André Auler, ser humano de uma força incrível, encantador e charmoso que conquistou minha amizade gratuitamente e de primeira! Obrigada por seu meu anjo da guarda, por me salvar com a estatística, e também pelas boas risadas e tardes regadas a chimarrão, quantas saudades desse tempo bom que não volta. Ao Thalisson, meu parceiro e companheiro que também sempre esteve ao meu lado. Obrigada pelas conversas, conselhos e risadas (que não foram poucas) e um lembrete: mantenha a porta fechada! À Janaína, pela evolução espiritual e mental, pelas conversas descontraídas, ou não, pelos desabafos e por tudo que vivemos, jamais te esquecerei. À minha amiga Shaiane que conheci pelo instagram. Obrigada por ouvir minha história de vida, desabafos e choros, discussões sobre política, livros, séries e filmes, por me apresentar o autoconhecimento e por sempre me incentivar a ser melhor. Mal posso esperar por nosso encontro real oficial. À Aline, obrigada por todas as vezes que me incentivou a ser melhor, me colocou pra cima, me ajudou na estatística e nos mapas.

Aos amigos do grupo da praia, do café após o almoço, Dara, Rafa, LM e Marlon, obrigada pelos bons momentos e lembranças colecionadas. Aos demais amigos e colegas do laboratório FASCA e CLABMU e da UEPG, o meu muito obrigado por me ouvirem ou as vezes rirem das minhas piadas sem graças.

A todos os meus Professores da UNICENTRO, a quem devo a base da minha formação. E também a todos os Professores que tive desde os 3 aninhos de idade.

Agradeço à CAPES pelo auxílio financeiro para o desenvolvimento deste trabalho.

"As sanguíneas são positivas, alegres, comunicativas, sociáveis, faladeiras e possuem bom coração. Porém, são superficiais, falta empatia e são impulsivas." Autor desconhecido.

RESUMO

Devido ao crescimento populacional mundial acelerado tem se tornado comum o aumento da pressão sob áreas de preservação ambiental visando atividades como a mineração e a exploração agropecuária. Isto tem causado mudanças drásticas nas paisagens com consequências que tem afetado negativamente o clima do planeta. Geralmente, na área de Física Aplicada a Solos, são utilizadas técnicas convencionais para a caracterização no solo. No entanto, existem outras técnicas não convencionais que podem ser empregadas baseadas na interação de raios X e gama com a matéria. Técnicas como a atenuação de raios gama têm sido usada com sucesso há muitas décadas no estudo de propriedades como, por exemplo, a densidade e umidade do solo com base em parâmetros como o coeficiente de atenuação. Porém, existem ainda outros parâmetros de interação da radiação com a matéria interessantes que podem ser explorados visando a caracterização do solo. O Brasil possui uma vasta área sendo utilizada na agricultura e também áreas pertencentes a reservas florestais, cujo objetivo é proteger os biomas naturais. Muitas das últimas áreas localizam-se em solos pouco desenvolvidos (pouco intemperizados), como Cambissolos e Neossolos. Desta forma, caracterizar esses solos se torna vital tendo em vista a sua importância do ponto de vista ambiental. Na literatura científica, não existem relatos de estudos que abordem as propriedades de atenuação da radiação em solos de unidade de conservação (teoricamente protegidos de ações antrópicas) com pouca intemperização. Além disto, praticamente não existem estudos dos parâmetros de interação da radiação em solos mais jovens como os Neossolos, que estão em fase de formação, conhecidos pela textura mais arenosa, ausência de horizonte diagnóstico e presença de material da rocha de origem e de minerais de difícil intemperização. Este trabalho de tese está fundamentado nas seguintes hipóteses: 1) parâmetros de interação da radiação com a matéria apresentam variações mesmo guando a composição guímica do solo não possui diferenças significativas; 2) diferentes usos do solo alteram a sua composição química de modo a afetar os parâmetros de interação da radiação, de maneira que estes não possam ser considerados estáticos mesmo para um mesmo tipo de solo; 3) solos jovens pouco desenvolvidos (ausência de horizontes bem definidos) apresentam diferenças na composição química do solo e nos parâmetros de interação da radiação ao longo do perfil; 4) os parâmetros de interação da radiação podem ser utilizados na caracterização do solo, principalmente naqueles não submetidos à intervenção humana; e 5) mudanças no método de análise química do solo afetam as medidas dos parâmetros de interação da radiação. Este trabalho de tese está baseado em dois estudos. O objetivo do primeiro foi analisar os parâmetros de interação da radiação de diferentes horizontes (A: 0-13; AB: 13-30; Bi: 30-80; C: 80-127 cm) de um Cambissolo, localizado na unidade de conservação do Parque Estadual da Serra Dourada (PESD). Para a condução desse estudo foram obtidos dados da composição de óxidos dos horizontes por meio de dois métodos (fluorescência de raios X por dispersão de energia - EDXRF e por comprimento de onda - WDXRF), a fim de comparar os resultados obtidos entre eles. O coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ) foi obtido por meio de simulação computacional utilizando os programas XCOM, GEANT4 e Fluka. Com base nos dados de µ/p foram calculados os demais parâmetros: seções de choque molecular (σ_M) , atômica (σ_A) , eletrônica (σ_E) , número atômico efetivo (Z_{eff}) e densidade eletrônica (Nel). Os resultados indicam que ambas as técnicas de análise elementar se mostraram eficazes na detecção dos teores dos óxidos, entretanto a WDXRF

apresentou maior sensibilidade. No segundo estudo, o método da WDXRF foi aplicado na caracterização de um Neossolo Quartzarênico de um assentamento de agricultura familiar localizado na região da Amazônia Oriental. O solo foi submetido a dois sistemas de uso (Pasto e Roça de Toco), sendo uma área de mata utilizada como referência. O estudo foi conduzido ao longo de um perfil do solo nas camadas de 0-5, 5-10, 10-20 e 20-40 cm. Os resultados obtidos em ambos os solos (Cambissolo e Neossolo) possibilitaram novos insights acerca de como os conteúdos de óxidos afetam os parâmetros de interação da radiação, dado que esses parâmetros foram sensíveis às mudanças na composição química do solo. Ainda, foi possível uma análise de como os valores do coeficiente de atenuação são influenciados pelos métodos de simulação computacional como os baseados em Monte Carlo (GEANT4 e Fluka) e regra da mistura (XCOM). Os resultados do Cambissolo servirão de referência para estudos posteriores, em solos de mesma classificação oriundos de regiões localizadas próximas ao PESD, de modo a verificar como ações antrópicas podem vir a afetar esse tipo de solo. Os resultados obtidos para o Neossolo evidenciam que os usos afetaram a composição de óxidos, principalmente com relação aos óxidos relacionados aos minerais secundários (Al₂O₃, Fe₂O₃ e TiO₂). Tal fato evidencia como a ação antrópica pode afetar propriedades do solo que refletem em seus parâmetros de interação da radiação com a matéria. Por fim, os resultados obtidos para ambos os solos mostram que os parâmetros de interação, em combinação com os dados de análise elementar, podem servir de base para uma caracterização do solo. Geralmente, tais medidas são feitas com base em propriedades relacionadas a estrutura do solo, e nesse estudo foi proposto o uso de técnicas que utilizam amostras deformadas, ou seja, obtidas após a quebra de suas estruturas.

Palavras-chave: WDXRF, EDXRF, coeficiente de atenuação de massa, Cambissolo, Neossolo.

ABSTRACT

Due to the accelerated world population growth, increasing pressure on environmental preservation areas has become common, aiming at activities such as mining and agricultural exploitation. This has caused drastic changes in the landscapes with negative consequences that has been affected the planet's climate. Generally, in the physics field applied to soils, conventional techniques are used to the soil characterization. However, there are other nonconventional techniques that can be employed based on the X-ray and gamma ray interaction with the matter. Techniques such as gamma ray attenuation have been used successfully for many decades in the study of properties such as soil density and moisture based on the attenuation coefficient parameter. Although, there is still other radiation interaction parameters that can be explored aiming the soil characterization. Brazil has a great area been used in the agriculture and also areas belonging to forest reserves, whose objective is to protect the natural biomes. Many of these areas are located on poorly developed (weathering soils) soils, such as Cambisols and Entisols. In this way, characterizing this type of soils has become vital because of its great importance in the environmental point of view. In the scientific literature, there is no report of studies that approach the radiation attenuation properties in soils of conservation units (protected of human action theoretically). Besides this, practically there is no study of the radiation attenuation properties of young soils such as Entisols that are in the formation phase, known for their sandy texture, absence of a diagnostic horizon and presence of the material from the original rock and with hard weathering minerals. This thesis study is based on the following hypothesis: 1) radiation interaction parameters present variation even when the chemical composition of the soil does not present significant differences; 2) different uses of the soils change its chemical composition and affect the radiation interaction parameters, in a way that this cannot be consider static even for the same type of soil; 3) young soil and poorly developed (absence of well-defined horizons) shows differences in the soil chemical composition and in the radiation interaction parameters along the soil profile; 4) the radiation interaction parameters can be used in the characterization of the soil, mostly in those not submit to human intervention; and 5) changes in the chemical analysis of the soil affect the calculation of the radiation interaction parameters. This thesis study is based on two studies. The objective of the first was to analyze the radiation interaction parameters of different horizons (A: 0-13, AB: 13-30, Bi: 30-80, C: 80-127 cm) of a Cambisol, located in the conservation unit of the Serra Dourada State Park (PESD). For the conduction of this study the oxide composition was obtained by two methods (X ray fluorescence by energy dispersion – EDXRF and by wavelength dispersion - WDXRF), in order to compare this obtained results. The mass attenuation coefficient (μ/ρ) was obtained through the computational simulation using the XCOM, GEANT4 and Fluka program. Based on the µ/p data the other radiation interaction parameters where calculated: the molecular (σ_M), atomic (σ_A), electronic cross sections (σ_E), effective atomic number (Z_{eff}) and electronic density (Nel). The results indicate that both elemental analysis techniques are effective in the oxide detection; however, the WDXRF showed more sensibility. In the second study, the WDXRF method was employed in the characterization of a Quartzarenic Entisol

of an agriculture familiar settlement located in the Oriental Amazon. The studied soils was submit to two uses system (Pasto and Roca de Toco), being a forest area used as reference. The study was conducted in a soil profile in the layers of 0-5, 5-10, 10-20 e 20-40 cm. The results obtained with both soils (Cambisol and Entisol) made possible new insights about how the oxide content affect the radiation interaction parameters, given that this parameters where sensitive to the chemical soil composition. Still, it was possible an analysis of how the values of the mass attenuation coefficient are influenced the computational simulation such as the ones based on the Monte Carlo (GEANT4 and Fluka) and the mixture rule (XCOM). The Cambisol results can be a reference for posterior studies, in soils with the same classification and located in regions next to the PESD, in a way to verify how human actions can affect this type of soil. The results obtained for the Entisol highlight that the uses affected the oxide soil composition, mostly in oxides related to the secondary minerals (Al₂O₃, Fe₂O₃ e TiO₂). Such fact highlights how human actions can affect soil properties that reflect in his radiation interactions parameters with the matter. Finally, the obtained results for both soils showed that the interaction parameters, in combination with the elemental analysis, serve as base for a soil characterization. Generally, such measurements are made with base in properties related to the soil structure, and in this study, was proposed the use of techniques that employed deformed samples, that is, obtained after the structure has been broken.

Key words: WDXRF, EDXRF, mass attenuation coefficient, Cambisol, Arenosol.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1.1 – a) Esquema de identificação dos limites dos horizontes (A, B, C) do solo ao longo de um perfil vertical b). Foto do perfil de um dos solos (Cambissolo) estudado no presente trabalho de tese. Apesar de apresentar material de origem no horizonte C, este perfil sob estudo não chegou até a rocha de origem. V7 indica a demarcação do ponto experimental onde foram coletadas as amostras de solo para Figura 2.1.2 - Triângulo de classe textural utilizado na determinação da textura do solo pela Sociedade Brasileira de Ciência do Solo (SBCS). A divisão dos solos argilosos em argiloso e muito argiloso não é considerada na classificação proposta Figura 2.2.1 - Esquema de representação de uma interação construtiva, ou seja, da Figura 2.3.1 - Esquema de nomeação de acordo com a transição entre níveis realizada pelo elétron......40 Figura 2.3.2 - Esquema de funcionamento de parte de um equipamento de fluorescência de raios X por dispersão de energia......41 Figura 2.3.3 - Esquema de funcionamento de parte de um equipamento de Figura 2.4.1 - Coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ) do óxido de ferro (Fe₂O₃) em função da energia dos fótons (E), para os diferentes efeitos parciais (efeito fotoelétrico, efeito Compton e produção de pares) de interação da radiação e para o µ/p total (considera a soma de todos os efeitos parciais. As áreas hachuradas Figura 2.5.1 - Relação existente entre a seção de choque molecular (σ_M) e o coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ).....48 Figura 2.5.2 - Relação existente entre a seção de choque atômica (σ_A) e o coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ).....49 Figura 2.5.3 - Relação existente entre a seção de choque eletrônica (σ_E) e o Figura 2.6.1 - Esquema de montagem teórico-experimental para aquisição dos valores do coeficiente de atenuação de massa (µ/p) por meio do método baseado na simulação de Monte Carlo (GEANT4).....54 Figura 2.6.2 - Esquema de uma montagem experimental utilizada para extrair medidas de µ/p em uma simulação utilizando o Método de Monte Carlo no Fluka Figura 3.2.1 - Distribuição dos pontos de coleta das amostras de solo (V1 a V8) -Parque Estadual da Serra Dourada (PESD). Circulado, a região de coleta do Cambissolo estudado......65 Figura 3.2.2 - Vista panorâmica da região no ponto de coleta do perfil de solo (esquerda) e imagem contendo a descrição morfológica do perfil V7 (direita). Os termos A, AB, Bi e C indicam os horizontes do perfil do Cambissolo estudado.......65 Figura 3.2.3 - Esquema de funcionamento do picnômetro a gás. Após a pressão interna do equipamento estar zerada há a entrada do gás (A), sendo controlada pela válvula de entrada do gás (B) com a válvula seletora (C) no volume de referência

(D). Para o porta amostra (E), as válvulas I e II (F) ficam abertas. A pressão é então ajustada e o valor de P₁ é anotado. Então a válvula seletora (C) é mudada para o volume do porta amostra e P2 é anotada. Após as medidas, a válvula de saída do Figura 3.2.4 - Esquema de configuração do programa XCOM. Primeiramente, é selecionado o tipo de material (1) como elemento, composto ou mistura, para após selecionar o método de entrada das energias dos fótons de interesse (2). O próximo passo é a entrada de dados na forma da porcentagem das moléculas que fazem parte da mistura (3), para então selecionar a faixa de energia estudada (4) e inserir manualmente as energias adicionais de interesse (5). O programa fornece ainda a opção da escolha de gráficos para o coeficiente de atenuação total e para os diferentes efeitos parciais de interação da radiação (6). Após a entrada de todos os dados (configuração inicial) é necessário então submeter rodar a análise (7)......71 Figura 3.2.5 - Exemplo de saída (gráfico) para a amostra selecionada anteriormente 8) e tabela apresentando os resultados obtidos dos coeficientes de atenuação de Figura 3.3.1 - Variação dos conteúdo de areia (em preto) e óxido de silício (SiO₂) (em vermelho) dos horizontes do Cambissolo estudado. As letras minúsculas acima dos pontos indicam as diferenças significativas entre os horizontes (SiO2- em Figura 3.3.2 - Tendência de variação dos principais óxidos detectados pelas metodologias do EDXRF (em vermelho) e WDXRF (em preto). As letras minúsculas acima dos pontos são diferenças significativas entre os horizontes, e as maiúsculas diferenças significativas entre os métodos (WDXRF- em preto; EDXRF- em Figura 3.3.3 - Correlação entre os índices Ki e Kr em relação aos óxidos utilizados no cálculo desses índices (equações 3.2.7.1 e 3.2.7.2) para o método da EDXRF..79 Figura 3.3.4 - Correlação entre os índices Ki e Kr em relação aos óxidos utilizados no cálculo desses índices (equações 3.2.7.1 e 3.2.7.2) para o método da WDXRF.80 Figura 3.3.5 - Variação do coeficiente de atenuação de massa (µ/p) e seções de choque molecular, atômica e eletrônica (σ_M , σ_A and σ_E) em função do intervalo de energia para o Cambissolo estudado pelas metodologias do EDXRF e WDXRF. A, AB, Bi e C representam os horizontes do solo......82 Figura 3.3.6 - Análise da relação entre os óxidos de SiO₂ e Fe₂O₃ com o coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ) e óxido de Fe₂O₃ com as seções de choque atômica e Figura 3.3.7 - Relação entre as seções de choque molecular, atômica e eletrônica $(\sigma_{M}, \sigma_{A} e \sigma_{E})$ em função do coeficiente de atenuação de massa (µ/p), para as metodologias da EDXRF e WDXRF. A, AB, Bi e C representam os horizontes do Figura 3.3.8 - Variação do número atômico efetivo e densidade eletrônica (Zeff e Nel) em função do intervalo de energia estudado e análise da relação entre Z_{eff} e N_{el} para as metodologias de EDXRF e WDXRF. A, AB, Bi e C representam os horizontes do solo.....91 Figura 3.3.9 - Variação do coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ) para os dois métodos de simulação de Monte Carlo (GEANT4 e Fluka) em função da energia dos fótons para o Cambissolo estudado. A, AB, Bi e C representam os horizontes do Figura 3.3.10 - Variação do coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ) para os guatro horizontes (A, AB, Bi e C) do perfil do Cambissolo estudado para os diferentes métodos de simulação (XCOM- em preto, GEANT4- em vermelho, Fluka- em azul). As letras maiúsculas indicam as diferenças significativas entre os métodos (XCOM-Figura 3.3.11 - Difratogramas dos horizontes (A, AB, Bi e C) do Cambissolo estudado. Neles estão indicados os minerais encontrados nos horizontes do Cambissolo (Gbs-gibbsita; Ms- muscovita; Qz- guartzo). Figura 4.2.1 - Mapa da localização do Estado do Tocantins e da região na gual se encontra o lote 52 localizado no município de Esperantina (TO) e imagem do município atualmente extraída do Google Earth.110 Figura 4.3.1 - Tendência de variação do coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ) (linha preta) e do óxido Fe₂O₃+TiO₂ (linha azul), em função das camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT). As linhas verticais indicam o desvio padrão da média.....121 Figura 4.3.2 - Curvas do coeficiente de atenuação de massa (µ/p) em função do intervalo de energia selecionado para estudo (1 keV – 100 MeV) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT) para as quatro camadas (0-50, 5-10, 10-20, 20-40 Figura 4.3.3 - Tendência da seção de choque molecular (σ_M) (linha azul), n_iA_i total (linha preta) e niAi SiO₂ (linha azul) em função das camadas do solo analisado para os diferentes usos (Mata – MA, Pasto – PA e Roca de Toco – RT)......126 Figura 4.3.4 - Curvas da seção de choque molecular (σ_M) em função do intervalo de energia selecionado (1 keV – 100 MeV) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Figura 4.3.5 - Tendência da seção de choque atômica (σ_A) (linha preta) e do óxido Fe₂O₃ (linha azul) em função das camadas de solo analisadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-Figura 4.3.6 - Curvas da seção de choque atômica (σ_A) em função do intervalo de energia (1 keV – 100 MeV) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT) Figura 4.3.7 - Tendência de variação da seção de choque eletrônica (σ_E) (linha preta) e do óxido Fe₂O₃ (linha azul) em função das camadas analisadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT)......134 Figura 4.3.8 - Curvas de variação da seção de choque eletrônica (σ_E) em função do intervalo de energia selecionado para estudo (1 keV – 100 MeV) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT) para as quatro camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm)......136 Figura 4.3.9 - Tendência de variação do número atômico efetivo (Zeff) (linha preta) e Fe₂O₃ (linha azul) em função das camadas analisadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm) e de Z_{eff} em função do intervalo de energia (1 keV – 100 MeV) para os usos do solo Mata (MA), Pasto (PA) e Roça de Toco (RT).....140 Figura 4.3.10 - Tendência de variação da densidade eletrônica (Nel) (linha preta) e SiO₂ (linha azul) em função das camadas analisadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm) e de Z_{eff} em função do intervalo de energia (1 keV – 100 MeV) para os usos do solo Mata (MA), Pasto (PA) e Roça de Toco (RT)......142

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.4.1 - Porcentagem de ocorrência dos efeitos dominantes (efeito fotoelétrico, efeito Compton e produção de pares) para algumas energias de fótons selecionada......47 Tabela 2.5.1 - Valores de composição química elementar dos óxidos majoritários do solo (SiO₂, Al₂O₃, Fe₂O₃, TiO₂) e suas influências nos parâmetros de interação da radiação (μ/ρ, σ_M, σ_A, σ_E, Z_{eff}, N_{el}).....52 Tabela 3.2.1 - Informações sobre a profundidade (Prof.) dos horizontes (Hor.), cor (de acordo com a carta de Munsell), tipo, tamanho e grau da estrutura do Cambissolo estudado......64 Tabela 3.3.1 - Valores percentuais (%) das frações areia, silte e argila, classe textural e densidade de partículas (ps) (método do picnômetro a gás) para o perfil do Tabela 3.3.2 - Teores dos óxidos mais abundantes nos quatro horizontes (A, AB, Bi e C) do perfil do Cambissolo, em porcentagens, para as metodologias da EDXRF e WDXRF. Ki e Kr representam os índices de intemperismo......76 Tabela 3.3.3 - Valores dos coeficientes correlação (R) e de determinação (R²) e demais parâmetros para as relações lineares (y=a*x+b) apresentadas nas Figuras 3.3.1.3 e 3.3.1.4. Os parâmetros a e b indicam os coeficientes angular e linear, Tabela 3.3.4 - Valores dos parâmetros de interação da radiação (coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ), seções de choque molecular (σ_M), atômica (σ_A), eletrônica (σ_E), número atômico efetivo (Z_{eff})) para as metodologias da EDXRF e WDXRF, para fótons de energia de 59,5 keV, correspondentes à fonte de ²⁴¹Am. A, AB, Bi e C representam os horizontes do solo......84 Tabela 3.3.5 - Valores da correlação de Pearson (R) e demais parâmetros para as relações lineares (y=a*x+b) apresentadas na Figura 3.3.2.2. Os parâmetros a e b indicam os coeficientes angular e linear, respectivamente. Os dados referem aos parâmetros obtidos utilizando o método de WDXRF......85 Tabela 3.3.6 - Valores de µ/p obtidos por meio da simulação computacional de Monte Carlo (GEANT4 e Fluka). Os valores obtidos através do programa XCOM são Tabela 4.2.1 - Valores médios das partículas de argila, silte e areia (%) e classe textural dos solos sob os dois usos, Pasto (PA) e Roça de Toco (RT), e a área de referência sob Mata (MA) para as quatro camadas analisadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-Tabela 4.3.1 - Valores médios dos óxidos mais abundantes do solo, seguidos pelo desvio padrão (valores entre parênteses), obtidos pelo método da fluorescência de raios X por comprimento de onda (WDXRF), para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT) para as quatro camadas estudadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm). Tabela 4.3.2 - Valores médios do coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ) seguidos pelo desvio padrão (valores entre parênteses), obtidos no XCOM a partir dos dados

de óxidos da WDXRF, para a energia específica de ~59,5 keV (²⁴¹Am), para a Mata

(MA), Pasto (PA) e Roça de Toco (RT) para as quatro camadas (0-5, 5-10, 10-20, Tabela 4.3.3 - Valores da contribuição dos óxidos Fe₂O₃ e TiO₂ no coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ) para cada camada analisada (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e Roça de Toco (RT).....121 Tabela 4.3.4 - Porcentagem da contribuição dos efeitos fotoelétrico e Compton no valor do coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ) para o Pasto (PA), a Roça de Toço Tabela 4.3.5 - Valores médios de σ_M , seguidos do desvio padrão, para a energia específica de ~59,5 keV (241Am) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT) para as quatro camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm)......124 Tabela 4.3.6 - Valores médios de niAi (ua) e desvio padrão (valor entre parênteses), para as três repetições da camada 0-5 cm do Neossolo para a área de referência (Mata – MA)......125 Tabela 4.3.7 - Valores médios da seção de choque atômica (σ_A) e do desvio padrão, para a energia específica de ~59,5 keV (241Am) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT) para as quatro camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm)......129 Tabela 4.3.8 - Valores médios da seção de choque eletrônica (σ_E) e desvio padrão, para a energia específica de ~59.5 keV (241Am), para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT) e para as quatro camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm)......133 Tabela 4.3.9 - Valores médios do número atômico efetivo (Zeff) e desvio padrão para a energia específica de ~59,5 keV (241Am) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT) para as quatro camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm)......137 Tabela 4.3.10 - Abundância fracional (fi) dos principais óxidos detectados pelo método da fluorescência de raios X por comprimento de onda (WDXRF) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT) para as quatro camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm). Os demais óxidos correspondem a f<0,001 e não foram considerados......138 Tabela 4.3.11 - Valores médios da densidade eletrônica (Nel) e do desvio padrão (valores entre parênteses) para a energia específica de ~59.5 keV (241Am) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT) para as quatro camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm)......141

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

- EDXRF Energy Dispersive X Ray Fluorescence (Fluorescência de Raios X por Dispersão de Energia)
- WDXRF Wavelenght Dispersive X Ray Fluorescence (Fluorescência de Raios X por Dispersão de Comprimento de Onda)
- DRX Difração de Raios X

LISTA DE SÍMBOLOS

- Coeficiente de atenuação linear Coeficiente de atenuação de massa μ μ/ρ
- Seção de choque molecular σ_M
- Seção de choque atômica σ_A
- Seção de choque eletrônica σ_E
- Número atômico efetivo Zeff
- Nel Densidade eletrônica
- Densidade de sólidos ρs
- Massa de sólidos тs
- Vs Volume de sólidos

1 INTRODUÇÃO	20
REFERÊNCIAS	27
2 TEORIA	32
2.1 O SOLO: HORIZONTES, INTEMPERISMO, TEXTURA E DENSIDADE PARTÍCULAS	DE 32
2.2 DIFRAÇÃO DE RAIOS X	37
2.3 FLUORESCÊNCIA DE RAIOS X	39
2.4 ATENUAÇÃO DE RAIOS X E GAMA	41
2.5 PROGRAMA XCOM	47
2.6 SIMULAÇÕES DE MONTE CARLO	53
REFERÊNCIAS	55
3 CARACTERIZAÇÃO ELEMENTAR E TEÓRICO-EXPERIMENTAL D PARÂMETROS DE INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO DE UM CAMBISSOLO PARQUE ESTADUAL DA SERRA DOURADA	DO 00 58
3.1 INTRODUÇÃO	60
3.2 MATERIAIS E MÉTODOS	63
3.3 RESULTADOS E DISCUSSÃO	74
3.4 CONCLUSÕES	97
REFERÊNCIAS	98
4 CARACTERIZAÇÃO DE UM NEOSSOLO QUARTZARÊNICO DA AMAZÔ ORIENTAL SUBMETIDO A DIFERENTES USOS POR MEIO DE PARÂMETR DE INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO	NIA 2 05 103
4.1 INTRODUÇÃO	105
4.2 MATERIAIS E MÉTODOS	109
4.3 RESULTADOS E DISCUSSÃO	114
4.4 CONCLUSÕES	143
REFERÊNCIAS	144
5 CONCLUSÕES GERAIS	148
6 PERSPECTIVAS FUTURAS	150
ANEXO A – COMPOSIÇÃO QUÍMICA DE ÓXIDOS TOTAL (CAMBISSOLO NEOSSOLO)) E 151

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO

O uso de fontes radioativas na ciência do solo e ambiental tem ocorrido desde os anos 50 do século passado (BELCHER et al., 1950; FERRAZ; MANSEL, 1979; BERNHARD; CHASEK, 1955). O método de análise baseado no espalhamento e absorção de raios gama oferece inúmeras vantagens em relação aos métodos convencionais como resolução de milímetros a micrômetros, trata-se de uma técnica não destrutiva e não invasiva, a qual permite a repetitividade de análises em uma mesma amostra, e apresenta sensibilidade para o estudo de mudanças na estrutura e/ou composição química elementar do solo (PIRES, 2018; PIRES et al., 2021). Quando um solo apresenta diferenças em seu conteúdo de argila, silte e areia, isto resultará em distintas composições químicas, as quais estarão associadas aos tipos de minerais presentes em cada uma de suas frações, de modo a influenciar como a radiação irá interagir com esse meio poroso (TECH et al., 2022a).

As fontes radioativas comumente utilizadas em medidas de parâmetros físicos do solo por meio da técnica baseada na atenuação de raios gama são ²⁴¹Am (~59,5 keV) e ¹³⁷ Cs (~662 keV). A escolha dessas fontes radioativas ocorre principalmente em virtude de suas meias-vidas (T_{1/2}), posição do fotopico no espectro de energia, custo da fonte e gastos com blindagem (PIRES, 2018; COSTA et al., 2014; PIRES et al., 2003).

Historicamente, os primeiros estudos utilizando materiais radioativos na ciência do solo eram experimentais, empregando as fontes de ¹³⁷Cs e ⁶⁰Co. Esses estudos pioneiros foram realizados nas décadas de 60 e 70 do século passado, e envolveram a determinação da umidade e da densidade do solo, associando a atenuação do número de fótons que atravessam a amostra, com sua quantidade de ar e sua espessura, o que dá origem ao que é conhecido como coeficiente de atenuação linear do material (COLGATE, 1952; DAVIDSON et al., 1963, CONNER et al., 1970; COREY et al., 1971).

A fonte de ²⁴¹Am passou a ser usada na ciência do solo com o trabalho de King (1967), que propôs a medida da umidade do solo utilizando-se os fótons gama emitidos por essa fonte radioativa. Antes disto, tal fonte radioativa era pouco empregada devido à necessidade de sua produção em laboratório, o que aumentava os custos na aquisição de tal tipo de fonte (FERRAZ; MANSEL, 1979). No entanto, fatores tais como a baixa energia dos fótons gama desta fonte, ~59,5 keV, e a meia

vida de aproximadamente 460 anos, tornam a fonte radioativa de ²⁴¹Am uma das mais utilizadas na área de física aplicada a solos (TSVETYANSKY; ERITENKO, 2020; TEKIN et al., 2020, SHARMA et al., 2021).

Experimentalmente, o que se obtém na atenuação de raios gama, é o coeficiente de atenuação linear, μ , entretanto a interação de raios gama depende da densidade, ρ , do material investigado (PIRES et al., 2009). Ao dividir-se o coeficiente de atenuação linear pela densidade do material, cria-se o coeficiente de atenuação de massa, μ/ρ (CULLITY, 1978; PIRES et al., 2021). Esta divisão facilita a interpretação dos resultados dos diversos elementos, compostos e misturas que podem ser analisados de acordo com este parâmetro. O uso do coeficiente de atenuação linear é limitado, pelo fato deste parâmetro (μ) variar com a densidade do material. Por exemplo, quando um material se encontra em diferentes estados da matéria (sólido, líquido ou gasoso) o coeficiente de atenuação linear irá variar, mesmo que o absorvedor possua a mesma composição molecular (CULLITY, 1978).

O coeficiente de atenuação pode ser determinado tanto experimentalmente como teoricamente. Hubbell e Seltzer (1987) publicaram um artigo descrevendo o programa computacional, batizado por eles de XCOM, capaz de calcular os valores do coeficiente de atenuação de massa. O programa baseia-se na composição química de um determinado material, possibilitando analisar como o coeficiente de atenuação varia em um intervalo de energia de 1 keV a 100 GeV. Além disso, o programa ainda possibilita calcular os valores dos coeficientes de atenuação ou seções de choque para energias específicas, como por exemplo, as energias das fontes radioativas mais utilizadas na ciência do solo (CAMARGO et al., 2021).

Desde então, o XCOM tem sido o programa mais utilizado na obtenção computacional do coeficiente de atenuação de massa de diferentes tipos de materiais como cimentos (BHANDAL; SINGH, 1993), aminoácidos (HANAGODIMATH; MANOHARA, 2007; SINGH et al., 1992), polímeros (SINGH et al., 2015a) e solos, para citar alguns (APPOLONI; RIOS, 1994; AL-MASRI et al., 2013; PIRES et al., 2019; PRANDEL et al., 2021). Os valores do coeficiente de atenuação obtidos pelo programa XCOM geralmente são utilizados como referência na comparação com outros métodos teóricos (baseados na simulação de Monte Carlo) ou mesmo com medidas experimentais.

O coeficiente de atenuação pode ser obtido também por meio de métodos baseados na simulação de Monte Carlo (PIRES; MEDHAT, 2016). GEANT4, Fluka e MCNP são alguns dos códigos computacionais que se baseiam no método de Monte Carlo. Este método também tem sido amplamente utilizado na análise de diferentes materiais em inúmeras áreas científicas e tem se mostrado uma ferramenta poderosa na análise da interação da radiação com a matéria (SINGH et al., 2014; SINGH; MEDHAT, 2014; SINGH et al., 2015a; SINGH et al., 2015b; MEDHAT; WANG, 2013; MEDHAT et al., 2014; TEKIN, 2016; SINGH; MEDHAT, 2016; MEDHAT et al., 2017; SHARMA et al., 2019; ABOUHASWA et al., 2021; ALDHUHAIBAT et al., 2021). Os métodos baseados na simulação de Monte Carlos são interessantes porque possibilitam simular teoricamente a montagem de uma medida experimental, ou seja, permitem variar o tipo de fonte, tipo de feixe, distância fonte-detector, tipo de detector, espessura da amostra, etc.

A partir de medidas do coeficiente de atenuação de massa é possível a derivação de inúmeros parâmetros de interação da radiação como as seções de choque molecular (σ_M), atômica (σ_A), eletrônica (σ_E), o número atômico efetivo (Z_{eff}) e a densidade eletrônica (N_{el}). Estes parâmetros físicos estão diretamente relacionados com a composição química do solo. Portanto, a comparação de diferentes métodos de obtenção da composição química e também do coeficiente de atenuação de massa é de suma importância para que esses métodos possam ser aprimorados, atendendo assim às necessidades de cada área de pesquisa na qual esses parâmetros de interação são utilizados (e.g. análise de propriedades físicas do solo, cálculos de blindagem, proteção radiológica, etc).

O coeficiente de atenuação linear está relacionado com a probabilidade de um elemento ou composto absorver ou espalhar a radiação por unidade de comprimento (TECH et al., 2022a). Entre os fatores que influenciam o coeficiente de atenuação podemos destacar a energia do fóton, a densidade e a espessura do material absorvedor, além de sua composição química. Portanto, mudanças na composição química do solo, poderão causar alterações no coeficiente de atenuação de massa, que por sua vez, poderão influenciar os parâmetros de interação da radiação, dada as relações de dependência existentes entre esses parâmetros. As seções de choque (molecular, atômica e eletrônica) estão relacionadas com a probabilidade de interação dos fótons com o solo. Neste caso, a seção de choque molecular, é correspondente à probabilidade de interação dos fótons incidentes com as moléculas que compõem o solo. Já a seção de choque atômica está relacionada com a probabilidade de interação dos fótons com os átomos que constituem as diversas moléculas que compõem o solo. Por fim, a seção de choque eletrônica está relacionada com a probabilidade de interação dos fótons com os étomos que constituem os átomos que compõem o solo. Por fim, a seção de choque eletrônica está relacionada com a probabilidade de interação dos fótons com os elétrons que constituem os átomos que compõem o solo (TECH et al., 2022b).

No caso do solo, a probabilidade de interação dos fótons irá depender do número atômico e da densidade do solo, como já expressado anteriormente. Porém, para materiais compostos, como é o caso do solo, não é possível designar um único número atômico que caracterize esse tipo de material. Desta forma, Hine (1952) propôs o cálculo do número atômico efetivo e da densidade eletrônica. Estes parâmetros tem como objetivo fornecer uma média dos números atômicos e da densidade eletrônica de todas as moléculas presentes na composição química do solo. Para que o cálculo destes parâmetros seja realizado, uma das formas é utilizar as seções de choque já descritas.

Os solos representam sistemas complexos, cujo processo de formação se dá a partir do intemperismo das rochas da litosfera. Os fatores que influenciam no processo de formação do solo são clima, relevo e ação de organismos vivos, material de origem e tempo. Estes fatores atuam diretamente na rocha que irá originar o solo e esculpem o relevo formando diversas classes de solos (LEPSCH, 2010).

Solos mais expostos aos fatores de formação possuem maior intemperização, como por exemplo, os Latossolos, que são exemplos de solos mais desenvolvidos. Há também os solos que estão em fase intermediária do processo de intemperização, não sendo tão desenvolvidos, como por exemplo, os Cambissolos. Esses solos possuem um horizonte diagnóstico chamado de horizonte Incipiente, localizado abaixo dos horizontes mais superficiais do solo (A e AB). Esse horizonte é interessante porque traz informações sobre o processo de intemperização que o solo está sofrendo (SANTOS et al., 2018).

Os solos que estão no início do processo de intemperização, como por exemplo, os Neossolos, são solos menos desenvolvidos ou em fase de formação.

Esses solos são caracterizados por apresentarem muitas informações e características inerentes ao material de origem (rocha) do solo. Como consequência, esse solo possui pouca diferenciação entre os horizontes e predomínio de características do material de origem (SANTOS et al., 2018).

O estudo dos parâmetros de interação da radiação, incluindo os solos, tem se concentrado no emprego de métodos experimentais e computacionais, como aqueles baseados na regra da mistura (XCOM) ou simulação de Monte Carlo (PIRES et al., 2019; FERREIRA et al., 2018; MEDHAT et al., 2014; PIRES et al., 2014; KUCUK et al., 2013; UN et al., 2012; KUMAR et al., 1996; MUDAHAR; SAHOTA 1988). Esses estudos têm abrangido solos de diferentes tipos quando consideradas as suas texturas e mineralogias, além do impacto de ações antrópicas na composição química do solo e, consequentemente, em seus parâmetros de interação.

É válido ressaltar que a análise dos parâmetros de interação da radiação em solos, onde não houve ações antrópicas, ainda são escassos na literatura científica. Desta forma, quando solos pouco manejados são estudados, a caracterização de seus parâmetros de interação pode servir de base para a análise desses solos quando submetidos a diferentes processos, como por exemplo, usos e manejos distintos.

Ainda existem poucos estudos abordando a análise dos parâmetros de interação da radiação em solos na fase inicial de desenvolvimento, como os Neossolos, principalmente em países de clima tropical (KODUM, 2021). O estudo dos parâmetros de interação em função da composição química do solo e também em função de suas camadas (ou horizontes) pode trazer informações adicionais sobre como esses parâmetros podem variar ao longo do perfil do solo. Tais resultados podem ser utilizados na caracterização do solo bem como em medidas mais representativas de como o solo pode atuar na atenuação da radiação, tendo interesse principalmente na área de proteção radiológica.

Geralmente, os estudos existentes na literatura com solos se concentram apenas nos valores do coeficiente de atenuação de massa, número atômico efetivo e densidade eletrônica (PIRES et al., 2014; MEDHAT et al., 2014). Estudos focados nas seções de choque, que são necessárias para os cálculos do número atômico efetivo e densidade eletrônica, ainda são escassos. Além disso, a análise das seções de choque podem trazer novos *insights* acerca da caracterização física do solo em termos de sua composição química. *Insights* que muitas vezes são impossíveis quando somente o coeficiente de atenuação de massa é medido.

Estudos envolvendo Cambissolos e Neossolos são geralmente escassos, mesmo em termos da análise de propriedades físicas convencionais. Isto se deve principalmente ao menor interesse econômico na exploração desses solos. Pode-se dizer que praticamente inexistem estudos na literatura científica mundial explorando os parâmetros de interação da radiação em Cambissolos e Neossolos (PIRES et al., 2019; KODUM, 2021; TECH et al., 2022b; CAMARGO et al., 2022).

Desta forma, na primeira parte deste trabalho de tese é proposto o estudo da composição química, da densidade de partículas e dos parâmetros de interação da radiação (σ_M , σ_A , σ_E , Z_{eff} e N_{el}) de um Cambissolo, oriundo de uma Unidade de Conservação localizada no Parque Nacional da Serra Dourada (Goiás-GO). Além das medidas dos parâmetros de interação da radiação, foi realizada a comparação de dois métodos de obtenção da composição química do solo pela técnica de fluorescência de raios X (FRX). Com base nas composições químicas obtidas pelos dois métodos, foi efetuada a comparação dos parâmetros de interação das parâmetros de interação dos parâmetros de interação dos parâmetros de interação para ambos os métodos.

Além da comparação dos dois métodos de medida por FRX, foi efetuada a obtenção do coeficiente de atenuação por métodos baseados na simulação de Monte Carlo (GEANT4 e Fluka). Os valores obtidos por esses métodos foram comparados com os valores oriundos da regra da mistura (XCOM), utilizando como entrada a composição química (óxidos) obtida a partir da fluorescência de raios X por dispersão de comprimento de onda.

Existe um estudo na literatura científica que trata da caracterização de um Neossolo usando os parâmetros de interação da radiação, que é o trabalho de Kodum (2021) que analisou um Neossolo Litólico com material de origem Quartzito ou Quartzo-xisto, extraídos do interior de uma caverna de uma unidade de conservação no Parque Estadual da Serra Dourada. Geralmente, os demais trabalhos envolvendo Neossolos Quartzarênicos estão relacionados com análises de propriedades químicas e físicas como, teores de carbono e nitrogênio, níveis de pH do solo entre outras análises mais convencionais (FRAZÃO et al., 2008; VOLPE et al., 2008; SALES et al., 2010).

Com base nos resultados do primeiro capítulo, no segundo foi selecionado o método (FRX) que foi considerado o mais representativo na obtenção da composição química do solo para o cálculo do coeficiente de atenuação de massa pela regra da mistura (XCOM). No segundo capítulo, é analisado um Neossolo Quartzarênico oriundo da Amazônia Oriental localizado em uma área situada no extremo noroeste do Estado do Tocantins. A composição química e os parâmetros de interação da radiação foram utilizados na análise do efeito de dois métodos de plantio, que foram comparados com o solo localizado em área de referência. Os parâmetros de interação da radiação foram empregados para caracterizar o Neossolo de acordo com os sistemas de plantio e classificar seus efeitos com base na composição química elementar.

Este trabalho de tese está fundamentado nas seguintes hipóteses: 1) parâmetros de interação da radiação apresentam variações mesmo quando a composição química do solo não possui diferenças significativas; 2) diferentes usos do solo alteram a sua composição química de modo a afetar os parâmetros de interação da radiação, de maneira que estes não possam ser considerados estáticos mesmo para um mesmo tipo de solo; 3) solos jovens pouco desenvolvidos (ausência de horizontes bem definidos) apresentam diferenças na composição química do solo e nos parâmetros de interação da radiação da radiação ao longo do perfil; 4) os parâmetros de interação da radiação podem ser utilizados na caracterização do solo, principalmente naqueles não submetidos a intervenção humana; e 5) mudanças no método de análise química do solo afetam as medidas dos parâmetros de interação da radiação.

OBJETIVOS GERAIS

- Caracterizar um solo (Cambissolo) oriundo de uma unidade de conservação a partir da composição química de seus horizontes e dos parâmetros de interação da radiação (μ/ρ, σ_M, σ_A, σ_E, Z_{eff} e N_{el});
- Caracterizar um solo em início de formação (Neossolo), submetido a três tipos de uso (Pasto, Roça de Toco e Mata), em termos de composição química e parâmetros de interação da radiação com a matéria (μ/ρ, σ_M, σ_A, σ_E, Z_{eff} e N_{el});

- Comparar a eficácia de dois métodos (fluorescência de raios X por dispersão de energia (EDXRF) e por dispersão de comprimento de onda (WDXRF)) na obtenção da composição química do solo e comparar as suas influências na obtenção dos parâmetros de interação da radiação (μ/ρ, σ_M, σ_A, σ_E, Z_{eff} e N_{el});
- Avaliar diferentes métodos de obtenção do coeficiente de atenuação de massa utilizando técnicas baseadas na simulação de Monte Carlo e na regra da mistura (XCOM).

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Analisar como as características físicas dos solos, por exemplo, a densidade de partículas e os parâmetros de intemperismo (K_i e K_r) se correlacionam com os parâmetros de interação da radiação (μ/ρ, σ_M, σ_A, σ_E, Z_{eff} e N_{el});
- Verificar a existência de correlações entre os parâmetros de interação da radiação (μ/ρ, σ_M, σ_A, σ_E, Z_{eff} e N_{el}) e os óxidos (SiO₂, Al₂O₃, Fe₂O₃) mais abundantes encontrados nos solos estudados;
- Estudar a existência de correlações entre os diferentes parâmetros de interação da radiação (μ/ρ, σ_M, σ_A, σ_E, Z_{eff} e N_{el}) analisados;
- Investigar como os usos do solo afetam a sua composição química e quais os possíveis impactos nos parâmetros de interação da radiação (μ/ρ, σ_M, σ_A, σ_E, Z_{eff} e N_{el});
- Observar se os parâmetros de interação da radiação (μ/ρ, σ_M, σ_A, σ_E, Z_{eff} e N_{el}) da radiação variam em função da profundidade do solo;
- Analisar a viabilidade de utilizar os parâmetros de interação da radiação na caracterização do solo.

REFERÊNCIAS

ABOUHASWA, A. S. et al. Synthesis, physical, optical, mechanical, and radiation attenuation properties of TiO₂-Na₂O-Bi₂O₃-B₂O₃ glasses. **Ceramics International**, v. 47, p. 185-204, 2021.

ALDHUHAIBAT, M. J. R. et al. Improved gamma radiation shielding traits of epoxi composites: Evaluation of mass attenuation coefficient, effective atomic and electron number. **Radiation Physics and Chemistry**, v. 179, p. 109183, 2021.

AL-MASRI, M.S. et al. Mass attenuation coefficients of soil and sediment samples using gamma energies from 46.5 to 1332 keV. **Journal of Environment Radioactivity**, v. 116, p. 28–33, 2013.

APPOLONI C. R.; RIOS, A. Mass Attenuation Coefficients of Brazilian Soils in the Range 10-1450 keV. **Applied Radiation and Isotopes**, v. 45, p. 287-291, 1994.

BELCHER, D. J.; CUYKENDALL T. R.; SACK H. S. The measurement of soil moisture and density by neutron and gamma ray scattering. **Technical Development Report**, n. 127. Civil Aeronautics Administration, Washington, D. C. 1950.

BERNHARD, R. K.; HARRIS J. N. Soil density determination by direct transmission of gamma ray. **American Society for Testing Materials**, Philadelphia, Pa., Preprint, n. 86. 1955.

BHANDAL G. S.; SINGH K. Photon Attenuation Coefficient and Effective Atomic Number Study of Cements. **Applied Radiation and Isotopes**, v. 44, p. 1231-1243, 1993.

CAMARGO, M. A.; KODUM, K. S.; PIRES, L. F. How Does the Soil Chemical Composition Affect Its Cross-sections, Effective Atomic Number and Electron Density? Computer Simulation Analysis to Highlight the Radiation-soil Interaction Processes. **Brazilian Journal of Physics**, v. 52 p. 154, 2022.

CAMARGO, M. A.; KODUM, K. S.; PIRES, L. F. How does the Soil Compositions Affect the Mass Attenuation Coefficient? A Study Using Computer Simulation to Understand the Radiation-Soil Interaction Processes. **Brazilian Journal of Physics**, v. 51, p. 1775-1783, 2021.

COLGATE, S. A. Gamma-Ray Absorption Measurements. **Physical Review**, v. 87, p. 592-601, 1952.

CONNER, A. L. et al. Gamma-Ray Attenuation-Coefficient Measurements. **Physical Review A**, v. 1, p. 539-544, 1970.

COREY J. C.; PETERSON, S. F.; WAKAT, M. A. Measurement of Attenuation of ¹³⁷Cs and ²⁴¹Am Gamma Rays for Soil Density and Water Content Determinations. **Soil Science Society of American Proceedings**, v. 35, p. 215-219, 1971.

COSTA, J. C. et al. Soil mass attenuation coefficient: Analysis and evaluation. **Annals of Nuclear Energy**, v. 64, p. 206-211, 2014.

CULLITY, B. D. **Elements of X-Ray Diffraction**. Massachusetts: Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1956.

DAVIDSON, J. M.; BIGGAR, J. W.; NIELSEN, D. R. Gamma-Radiation Attenuation for Measuring Bulk Density and Transient Water Flow in Porous Materials. **Journal of Geophysical Research**, v. 68, p. 4777-4782, 1963.

FERRAZ, E. S. B.; MANSELL, R. S. Determining water content and bulk density of soil by gamma-ray attenuation methods. **Technical Bulletin**, n°: 807. IFAS, Flórida 51p, 1979.

FERREIRA, T. R. et al. Surface liming effects on soil radiation attenuation properties. **Journal of Soils and Sediments**, v. 5, p. 13, 2018.

FRAZÃO, L. A. et al. Propriedades químicas de um Neossolo Quartzarênico sob diferentes sistemas de manejo no Cerrado mato-grossense. **Pesquisas Agropecuárias Brasileiras**, v. 43, p. 641-648, 2008.

HANAGODIMATH S. M.; MANOHARA S. R. Studies on effective atomic numbers and electron densities of essential amino acids in the energy range 1 keV-100 GeV. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B**, v. 258, p. 321-328, 2007.

HUBBELL, J. H.; SELTZER, S. M. Tables of X-ray mass attenuation coefficients and mass energy-absorption coefficients 1 keV to 20 MeV for elements Z=1 to 92 and 48 additional substances of dosimetric interest. **National Institute of Standards and Technology**, Gaithersburg, 1995.

KING, L. G. Gamma ray attenuation for soil-water-content measurement using ²⁴¹Am. In Symposium on the use of isotope and radiation techniques in soil physics and irrigation studies, Istambul, 1967, Vienna, **International Atomic Energy Association Report** SM-94/20, p. 17-29, 1967.

KODUM, K. S. Caracterização de solos da caverna abrigo da areia solta-GO-BR por técnica de espectroscopia e simulação de parâmetros de interação da radiação. Tese (Mestrado em Ciências – Área de concentração: Física) Universidade Estadual de Ponta Grossa, Ponta Grossa, 2021.

KUCUK, N.; TUMSAVAS, Z.; CAKIR, M. Determining photon energy absorption parameters for different soil samples. **Journal of Radiation Research**, v. 54, p. 578-586, 2013.

KUMAR, T. K.; REDDY, K. V.; VENKATARANAM, S. Effective atomic number studies in clay minerals for total photon interaction in the energy region 10 keV-10 MeV. **Radiation Physics and Chemistry**, v. 48, p. 707-710, 1996.

LEPSCH, I. F. Formação e Conservação dos Solos. 2ª ed. São Paulo: Oficina de Textos, 2010.

MEDHAT, M. E.; SINGH, V. P.; SHIRMARDI, S. P. Monte Carlo simulation for the estimation of iron human whole blood and comparison with experimental data. **Pramana Journal of Physics**, v. 88, p. 49, 2017.

MEDHAT, M. E.; SHIRMARDI, S. P.; SINGH V. P. Comparison of Geant4, MCNP Simulation Codes of Studying Attenuation of Gamma rays through Biological Materials with XCOM and Experimental Data. **Applied & Computational Mathematics**, v. 3, p. 6, 2014.

MEDHAT, M. E.; WANG, Y. Geant4 code for simulation attenuation of gamma rays through scintillation detectors. **Annals of Nuclear Energy**, v. 62, p. 316-320, 2013.

MUDAHAR, G. S.; SAHOTA, H. S. Effective Atomic Number Studies in Different Soils for Total Photon Interaction in the Energy Region 10-5000 keV. **Applied Radiation and Isotopes**, v. 39, p. 1251-1254, 1988.

PIRES, L. F.; CÁSSARO, F. A.M.; CORRECHEL, V. Use of nuclear techniques in soil Science: A literature review of the Brazilian contribution. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 45, 2021.

PIRES, L. F. et al. Radiation attenuation properties based on the quantification of soil components using the Rietveld Method. **Results in Physics**, v. 12, p. 2009-2011, 2019.

PIRES, L. F. Soil analysis using nuclear techniques: A literature review of the gamma ray attenuation method. **Soil & Tillage Research**, p. 216-234, 2018.

PIRES, L. F.; MEDHAT, M. E. Different methods of mass attenuation coefficient evaluation: Influences in the measurement of some soil physical properties. **Applied Radiation and Isotopes**, v. 111, p. 66-74, 2016.

PIRES, L. F. et al. Mineralogical composition of hardsetting soils and its effect on the radiation attenuation characteristics. **Journal of Soils and Sediments**, v. 16, p. 1059-1068, 2016.

PIRES, L. F.; PRANDEL, L. V.; SAAB, S. C. The effect of wetting and drying cycles on soil chemical composition and their impact in bulk density evaluation: An analysis by using XCOM data and gamma-ray computed tomography. **Geoderma**, v. 213, p. 512-520, 2014.

PIRES, L. F. et al. Gamma-ray attenuation method as an efficient tool to investigate soil bulk density spatial variability. **Annals of Nuclear Energy**, v. 36, p. 1734-1739, 2009.

PIRES, L. F. et al. Gamma-ray-computed tomography to investigate compaction on sewage-sludge-treated soil. **Applied Radiation and Isotopes**, v. 12, p. 17-25, 2003.

PRANDEL, L. V. et al. Can the Granulometric Soil Fractions Attenuate the Radiation Differently from the Whole Soil? **Brazilian Archives of Biology and Technology**, v. 64, p. 1-10, 2021.

SALES, L. E. O. et al. Qualidade Física de Neossolo Quartzarênico Submetido a Diferentes Sistemas de Uso Agrícola. **Ciências Agrotécnicas de Lavras**, v. 34, p. 667-674, 2010.

SANTOS, H. D. et al. Sistema Brasileiro de Classificação dos Solos. 5ª ed. EMBRAPA, 2018.

SINGH K.; BHANDAL G. S.; AHMED I. Determination of Effective Atomic Number and Electron Density of Some Fatty Acids and Gamma-ray Attenuation. **Applied Radiation and Isotopes**, v. 43, p. 1185-1188, 1992.

SINGH, V. P.; MEDHAT, M. E.; BADIGER, N. M. Photon attenuation coefficients of thermoluminescent dosimetric materials by Geant4 toolkit, XCOM program and experimental data: A comparison study. **Annals of Nuclear Energy**, v. 68, p. 96-100, 2014.

SINGH V. P. et al. Determination of mass attenuation coefficient for some polymers using Monte Carlo simulation. **Vaccum**, v. 06, p. 1-12, 2015a.

SINGH V. P.; MEDHAT, M. E.; SHIRMARDI, S. P. Comparative studies in shielding properties of some steel alloys using Geant4, MCNP, WinXCOM and experimental results. **Radiation Physics and Chemistry**, v. 106, p. 255-260, 2015b.

SINGH V. P.; MEDHAT, M. E.; BADIGER N. M. Photon energy absorption coefficients for nuclear track detectors using Geant4 Monte Carlo simulation. **Radiation Physics and Chemistry**, v. 106, p. 83-87, 2015c.

SINGH, V. P.; MEDHAT, M. E. Geant4 Monte Carlo code application in photon interaction parameter of composite materials and comparison with XCOM and

experimental data. Indian Journal of Pure & Applied Physcis, v. 54, p. 137-143, 2016.

SINGH V. P.; MEDHAT, M. E. Geant4 Monte Carlo code application in photon interaction parameter of composite materials and comparison with XCOM and experimental data. **Indian Journal of Pure & Applied Physics**, v. 54, p. 137-143, 2014.

SHARMA A. et al. Simulation of shielding parameters for TeO₂-WO₂ glasses using FLUKA code. **Results in Physics**, v. 13, p. 102199, 2019.

SHARMA, A.; SINGH, B.; SANDHU, B. S. A Compton scattering technique for wood characteristics using FLUKA Monte Carlo code. **Radiation Physics and Chemistry**, v. 182, p. 109364, 2021.

TECH, L. et al. Elemental and radiation attenuation parameter analyses to characterize a Cambisol from the Serra Dourada State Park, Brazil. **Environmental Earth Sciences**, v. 81. p. 63, 2022a.

TECH, L. T. et al. Radiaiton Attenuation Processes: the Role of Clay Porous Media. **Philippine Journal of Science**, v. 151, p. 823-832, 2022b.

TEKIN, H. O. et al. Sodium dodecatungstophosphate hydrate-filled polymer composites for nuclear radiation shielding. **Materials Chemistry and Physics**, v. 256, p. 123667, 2020.

TEKIN, H. O. MCNP-X Monte Carlo Code Application for Mass Attenuation Coefficients of Concrete at Different Energies by Modeling 3 X 3 Inch Nal(TI) Detector and Comparison with XCOM and Monte Carlo Data. **Science and Technology of Nuclear Installations**, v. 2016, p. 7, 2016.

TSVETYANSKY A. L.; ERITENKO, A. L. Separation of materials according to the effective atomic number using photons of two energies in the range of 60-700 keV. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B**, v. 462, p. 114-118, 2020.

UN, A.; SAHIN, Y. Determination of mass attenuation coefficients, effective atomic numbers, effective electron numbers and kermas for Earth and Matian soils. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B**, v. 288, p. 42-47, 2012.

VOLPE, E. et al. Renovação de pastagem degradada com calagem, adubação e leguminosa consorciada em Neossolo Quartzarênico. Acta Scientiarum Agronomy, v. 30, p. 131-138, 2008.

2 TEORIA

2.1 O SOLO: HORIZONTES, INTEMPERISMO, TEXTURA E DENSIDADE DE PARTÍCULAS

O solo é um sistema trifásico composto de partículas e poros o qual está sujeito a mudanças devido a diferentes tipos de processos (SANTOS et al., 2018). A matriz do solo é basicamente constituída de materiais de origem mineral e orgânica constituindo a chamada *pedosfera*. O sistema solo tem grande influência nos diferentes processos e ciclos que ocorrem na Terra, influenciando na qualidade da água e dos alimentos que consumimos, no ar que respiramos, nos processos de filtragem de contaminantes, na retenção e condução da água, no desenvolvimento das raízes das plantas, na diversidade da fauna do solo. (LEPSCH, 2010). Os processos do solo quando analisados naturalmente, verificadas situações nas quais ocorrem adições, perdas, translocações e transformações de energia e matéria ao longo do tempo; as quais são influenciadas por diferentes fatores como o clima, o relevo, as chuvas, a ação de organismos, as ações antrópicas. (KER et al., 2012). Para a humanidade, os solos constituem um dos bens mais valiosos e merecedores de proteção e por este motivo é importante estudá-lo (KER et al., 2012).

O processo de formação do solo se dá através do intemperismo de rochas expostas à atmosfera, uma vez que estão sujeitas a fatores externos como pressão, temperatura, umidade e ação de diferentes tipos de organismos (LEPSCH, 2010; KER et al., 2012). O intemperismo físico se dá por meio da alteração do tamanho e formato da rocha, ao passo que o intemperismo químico é ocasionado pela decomposição dessa rocha modificando a sua composição mineralógica (PRANDEL et al., 2017; LEPSCH, 2010). Esta é a "fase inicial" do processo de formação de um solo. Os minerais que muitas vezes constituem o material de origem da rocha podem manter a sua forma mesmo depois de fragmentados, como por exemplo, o mineral quartzo. Este é o principal mineral da fração areia do solo. Já os minerais presentes na fração argila são mais reativos e podem se decompor gradativamente se transformando em minerais secundários (HILLEL, 1998). Há também a matéria orgânica, presente principalmente na camada superficial do solo, a qual é originária de resíduos vegetais em diferentes estágios de decomposição, como os fragmentos

de carvão e a biomassa presentes no solo, resultantes de processos naturais (SANTOS et al., 2018).

Uma delimitação do solo, apropriada para o reconhecimento e para a realização de sua caracterização morfológica em campo, é o perfil de solo. Este consiste numa seção vertical que corta o solo desde a superfície até a rocha ou material de origem (KER et al., 2012). No perfil podem ser observadas, principalmente para solos mais intemperizados, uma série de camadas diferentes, as quais são chamadas de horizontes do solo (Figura 2.1.1). Estes são formados a partir dos processos de intemperismo, pedogenéticos ou antropogênicos, e sobrepostos em sequência apresentando diferenças na cor, textura, mineralogia, estrutura, etc. (KER et al., 2012). Entretanto, os horizontes muitas vezes podem não apresentar diferenças entre si, sendo difícil a identificação através da observação em campo, necessitando de resultados quantitativos obtidos em laboratório (Figura 2.1.1) (LEPSCH, 2010).

Figura 2.1.1 – a) Esquema de identificação dos limites dos horizontes (A, B, C) do solo ao longo de um perfil vertical b). Foto do perfil de um dos solos (Cambissolo) estudado no presente trabalho de tese. Apesar de apresentar material de origem no horizonte C, este perfil sob estudo não chegou até a rocha de origem. V7 indica a demarcação do ponto experimental onde foram coletadas as amostras de solo para posterior análise de propriedades físicas.



Fonte: a) Adaptado de: Hillel (1998). b) adaptado de: acervo pessoal de Vládia Correchel.

Após a formação do solo e de seus horizontes, é possível verificar que suas composições podem ser bastante diversificadas devido aos diferentes tipos de partículas (minerais) que o constituem, as quais possuem tamanhos e formatos distintos. As diferentes proporções das partículas do solo em termos de tamanho dão origem a sua textura. A Figura 2.1.2 introduz o triângulo de classe textural, o qual permite caracterizar o solo com base nas porcentagens das frações argila, silte e areia. Por exemplo, um solo contendo 20% de silte, 10% de areia e 70% de argila será classificado como muito argiloso, ao passo que um solo contendo 40% de silte, 30% de areia e 30% de argila será classificado como franco argiloso.

Figura 2.1.2 - Triângulo de classe textural utilizado na determinação da textura do solo pela Sociedade Brasileira de Ciência do Solo (SBCS). A divisão dos solos argilosos em argiloso e muito argiloso não é considerada na classificação proposta pela USDA (*United State Department of Agriculture*).



Fonte: adaptado de Molina Junior (2017).

Basicamente, o solo pode ser dividido em três frações, sendo elas: fração areia (partículas com diâmetro equivalente entre 2.000 a 50 μ m), silte (50 a 2 μ m – segundo a classificação da USDA/*United State Department of Agriculture* ou 20 a 2 μ m – segundo a classificação da IUSS/*Internacional Union of Soil Science*) e argila (<2 μ m). Segunda a classificação da Sociedade Brasileira de Ciência do Solo (SBCS), a fração areia é dividida em duas classes de tamanhos: areia grossa (2.000 a 20 μ m) e areia fina (50 a 20 μ m). A fração silte é caracterizada por partículas com tamanhos entre 50 e 2 μ m e a fração argila por partículas <2 μ m. O arranjo dessas
partículas em agregados devido a diferentes tipos de processos (naturais e artificiais) dará origem a estrutura do solo (HILLEL, 1998).

A densidade ocupada somente pelos sólidos do solo é chamada de densidade de partículas (ρ_s), a qual é definida pela relação entre a massa de solo seco (m_s) em estufa (105 °C por 24 h) e o volume de sólidos (V_s), expressa pela seguinte equação (Equação 2.1.1):

$$\rho_S = \frac{m_S}{V_S} \tag{2.1.1}$$

A densidade de partículas é uma propriedade física estável do solo que depende unicamente da composição das partículas sólidas, e este parâmetro não reflete as condições estruturais do solo. Essa densidade depende muito das frações mineral e orgânica do solo e pode ser considerada uma média ponderada das massas específicas dos diversos componentes da fração sólida do solo. Geralmente, a densidade de partículas varia de 2,60 a 2,70 g cm⁻³ o que reflete a presença do mineral quartzo, o qual possui densidade de partículas de 2,65 g cm⁻³. Já a densidade da matéria orgânica é aproximadamente 1,20 g cm⁻³ e sua presença no solo contribui para a diminuição do valor da densidade de partículas (LIBARDI, 2005).

Os métodos mais usados para medir a densidade de partículas do solo é o método do picnômetro com o uso de água destilada e vácuo, método de picnometria a gás e método do balão volumétrico com o uso de álcool etílico, como descrito pelo Manual de Métodos de Análises do Solo da EMBRAPA (EMBRAPA, 1997). O valor da densidade de partículas é frequentemente utilizado na determinação da porosidade total do solo, do tempo de sedimentação das partículas na análise textural e da separação de minerais leves e pesados em estudos mineralógicos (VAN LIER, 2010). Por este motivo, medidas representativas desse parâmetro físico são extremamente importantes.

As características físicas e químicas do solo, descritas nessa seção, auxiliam na sua classificação morfológica, a partir de observações no campo auxiliadas por análises laboratoriais. Cada solo possui características próprias relacionadas com sua formação, de modo a apresentar informações sobre o processo dinâmico de intemperismo sofrido por ele. Por isso, cada solo quando analisado, poderá apresentar propriedades distintas, mesmo que possuam a mesma textura, classificação ou origem.

2.2 DIFRAÇÃO DE RAIOS X

A difração de raios X ocorre essencialmente devido a existência de fases construtivas entre duas ondas ou mais. Um feixe difratado, a partir de um cristal, resulta da interação entre os raios X espalhados por todos os elétrons dos átomos de um cristal que estão no caminho do feixe incidente. Para que essa interação ocorra de maneira construtiva, o comprimento de onda λ dos raios X precisa ser da mesma ordem de grandeza das distâncias regulares entre os centros espalhadores (CULLITY, 1978).

Como exemplo ilustrativo, a Figura 2.2.1 traz a interação entre o feixe de raios X e o centro espalhador. A interferência construtiva ocorrerá somente quando as reflexões dos planos sucessivos (A, B, C) apresentarem diferença de percurso, entre os raios incidentes (1, 1a, 2, 3, 2a) e refletidos (1a', 2a', 1', 2', 3'), de um número inteiro do comprimento de onda. Para o caso ilustrado na figura a difração ocorre no plano B, onde $n\lambda = \overline{ML} + \overline{LN}$ (PECHARSKY; ZAVALIJ, 2015).





Fonte: Prandel (2015).

A lei de Bragg (Equação 2.2.1) apresentada na sequência é válida para qualquer plano cristalino:

$$n\lambda = 2dsen\theta \tag{2.2.1}$$

onde, *n* é a ordem da reflexão, λ é o comprimento de onda, *d* é a distância entre os planos cristalinos sucessivos e θ o ângulo de incidência em que ocorre a difração, ou ângulo de Bragg.

Há vários fatores que influenciam na intensidade dos feixes de raios X difratados (Pecharsky; Zavalij, 2005, Cullity, 1978). Um fator que deve ser

considerado é o fator de espalhamento atômico f, o qual pode ser definido como a razão entre a amplitude da onda espalhada por um átomo, $A_{\acute{a}tomo}$, e a amplitude da onda espalhada por um átomo (Equação 2.2.2):

$$f = \frac{A_{\acute{a}tomo}}{A_{el\acute{e}tron}} \tag{2.2.2}$$

Outro fator, é o da estrutura, F_{hkl} , que indica o espalhamento sofrido pela onda em cada cela unitária. Este fator descreve a coordenada uvw de cada ponto do interior do retículo e como este afeta o feixe espalhado (Equação 2.2.3):

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{N} f_i e^{2\pi i (hu_j + kv_j + wl_j)}$$
(2.2.3)

Há também o fator de Lorentz-Polarização, L_p , que relaciona a largura do feixe de radiação incidente não totalmente paralelo com a geometria do cristal (Equação 2.2.4):

$$L_p = \left(\frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \cos \theta}\right) \tag{2.2.4}$$

O fator de deslocamento atômico está relacionado com a vibração dos átomos em torno da sua posição de equilíbrio. Um aumento na temperatura significa um deslocamento dos picos, diminuição da intensidade do feixe de raios X e aumento da radiação de fundo. Este fator pode ser expresso da seguinte maneira (Equação 2.2.5):

 e^{-2M} (2.2.5)

onde, M é o tensor de deslocamento atômico, dado pela equação $M = 2\pi^2 \left(\frac{\overline{u}^2}{d^2}\right)$.

A intensidade dos picos pode então ser encontrada a partir da relação entre todos estes fatores a partir da equação (Equação 2.2.6):

$$I = |F|^2 p\left(\frac{1+\cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cos \theta}\right) e^{-2M}$$
(2.2.6)

2.3 FLUORESCÊNCIA DE RAIOS X

A fluorescência de raios X é um método de espectroscopia que está entre os mais comuns na determinação quantitativa e qualitativa da composição química de materiais. Isto se deve ao fato de ser uma técnica de análise rápida, fácil, versátil, de boa precisão, preparo simples das amostras e não destrutiva.

A produção de raios X ocorre em um tubo de raios X quando o material do filamento (cátodo) é aquecido até formar um potencial negativo e então liberar elétrons pelo efeito termiônico. O alvo (ânodo) é positivamente carregado o que cria uma diferença de potencial no tubo, que está sob vácuo. Os elétrons acelerados em feixe vão do cátodo (negativamente carregado) para o ânodo (positivamente carregado), e são desacelerados pelo alvo, originando raios X no processo de interação do feixe de elétrons com o alvo (EISBERG, 1979).

Ao incidir um feixe de raios X sob uma amostra ocorre a excitação dos elétrons que constituem os seus átomos. Essa interação dos raios X causa a ejeção de elétrons dos níveis de maior energia. Em adição ao elétron ejetado, a interação também cria uma vacância nas camadas de ligação. Esta vacância é rapidamente preenchida pelos elétrons de outras camadas do átomo, e então um fóton de raios X característico é emitido com uma energia específica, que depende da diferença de energia de ligação dos elétrons nos níveis quânticos (KNOLL, 2010). Esta energia está relacionada com o comprimento de onda pela seguinte relação (Equação 2.3.1):

$$E = \frac{hc}{\lambda} \tag{2.3.1}$$

onde, E e λ são respectivamente os valores de energia e comprimento de onda dos raios X característicos, *h* é a constante de Planck e *c* a velocidade da luz no vácuo.



Figura 2.3.1 - Esquema de nomeação de acordo com a transição entre níveis realizada pelo elétron.

Fonte: Adaptado de Serway (2005).

As transições que podem ocorrer dependendo do nível de energia no qual o elétron se encontra e qual ele irá ocupar. A nomeação é feita de acordo com a letra correspondente ao nível ocupado, seguido por uma letra grega que indica o nível que o elétron desocupou. A transição do nível energético L para o K é chamado de K_{α}, do nível M para o K, é chamado de K_{β}, e assim sucessivamente (Figura 2.3.1) (SERWAY, 2005; GRIEKEN, 2002).

Fluorescência de raios X por dispersão de energia (EDXRF)

Neste tipo de espectrômetro, um detector semicondutor irá medir a energia dos fótons que chegam a ele. Geralmente, é empregado em microscópicos eletrônicos, nos quais a captação de imagens é o objetivo principal e em equipamentos de raios X portáteis, nos quais a análise elementar rápida, é o objetivo principal.

O detector no equipamento de EDXRF tem dois objetivos, um deles é a detecção dos fótons em si e o outro é realizar a dispersão desses fótons. A Figura 2.3.2 traz uma ilustração do esquema de funcionamento de um equipamento de EDXRF.



Figura 2.3.2 - Esquema de funcionamento de parte de um equipamento de fluorescência de raios X por dispersão de energia.

Fonte: Adaptado de Schardosin (2018).

Fluorescência de raios X por dispersão de comprimento de onda (WDXRF)

Neste tipo de espectrômetro um cristal difrata os fótons antes de chegarem até o detector. Movendo o cristal e o detector (goniômetro) uma ampla região de espectro pode ser observada. A ausência de movimento significa que apenas um comprimento de onda será detectado (GRIEKEN, 2002).

No equipamento de WDXRF, o cristal tem a função de dispersão e o detector apenas a função de detecção dos fótons. A Figura 2.3.3 traz uma ilustração do esquema de funcionamento de um equipamento de WDXRF.





Fonte: Adaptado de Schardosin (2019).

2.4 ATENUAÇÃO DE RAIOS X E GAMA

Os mecanismos de absorção dos fótons de raios X e gama pela matéria são diferentes daqueles relacionados com a absorção de partículas carregadas, como as partículas alfa e beta. Essas diferenças ocorrem principalmente em função do maior poder de penetração dos raios X e gama na matéria. Quando fótons de diferentes energias interagem com a matéria irão sofrer atenuação, de modo que a intensidade dos fótons transmitidos diminuirá exponencialmente com o aumento da espessura do material absorvedor (KAPLAN, 1997).

Pode-se destacar três processos como os mais importantes na absorção de fótons pela matéria, sendo eles: efeito fotoelétrico, espalhamento incoerente (efeito Compton) e produção de pares. A mecânica quântica possibilita derivar equações para calcular a probabilidade de ocorrência de cada um desses efeitos, com base em suas seções de choque. Materiais com diferentes composições químicas e densidades irão atenuar a radiação de forma distinta. Um parâmetro que permite mensurar a capacidade de atenuação de cada material é o coeficiente de atenuação, o qual é expresso como a soma dos coeficientes de atenuação parciais devido aos três processos principais de interação da radiação mencionados (KNOLL, 2010; KAPLAN, 1997).

O coeficiente de atenuação linear, o qual expressa a probabilidade por unidade de comprimento de que um fóton seja absorvido, depende da energia dos fótons incidentes bem como da natureza do material estudado (composição química) e da espessura do absorvedor. É possível determinar experimentalmente o coeficiente de atenuação linear, μ, por meio da equação de Beer-Lambert (Equação 2.4.1) (KAPLAN, 1997):

$$\mu = \frac{1}{x} ln \frac{l_0}{l} \tag{2.4.1}$$

onde, x é a espessura da amostra, l₀ é a intensidade do feixe incidente na amostra e I é a intensidade do feixe transmitido pela amostra.

Considerando todos os efeitos parciais responsáveis pela atenuação dos fótons de raios X e/ou gama, o coeficiente de atenuação total será dado por:

$$\mu(T) = \mu(ef) + \mu(eC) + \mu(pp)$$
(2.4.2)

onde, μ (ef), μ (eC) e μ (pp) denotam os coeficientes de atenuação linear referentes ao efeito fotoelétrico, efeito Compton e produção de pares. O termo μ (T) se refere ao coeficiente de atenuação linear total (KAPLAN, 1997). No efeito fotoelétrico, toda a energia do fóton incidente é transferida para os elétrons ligados ao átomo. Parte dessa energia é utilizada para superar a energia de ligação do elétron ligado ao átomo e torná-lo livre, e o restante será fornecida como energia cinética ao elétron ejetado. Geralmente, os elétrons ejetados são oriundos das camadas mais internas (mais fortemente ligados ao núcleo do átomo), como por exemplo, a camada K (SERWAY, 2005). A probabilidade de que o efeito fotoelétrico (σ_{ef}) ocorra depende da energia do fóton, da energia de ligação do elétron e do número atômico do átomo com o qual o fóton está interagindo (KAPLAN, 1997) (Equação 2.4.3):

$$\sigma_{ef} = \phi_0 Z^{4-5} \left(\frac{1}{137}\right)^4 4\sqrt{2} \left(\frac{m_0 c^2}{h\nu}\right)^{7/2}$$
(2.4.3)

onde, Φ_0 é uma unidade conveniente para medir seções de choque e representa a seção de choque para espalhamentos de fótons de baixas energias por um elétron em repouso, Z é o número atômico do absorvedor, m₀c² representa a energia de repouso do elétron e h ν a energia do fóton incidente.

É importante observar a forte dependência de σ_{ef} com o número atômico e energia do fóton incidente. Esse parâmetro é proporcional a Z⁴⁻⁵ e inversamente proporcional a $(hv)^{7/2}$. A dependência com Z⁴⁻⁵ significa que, para uma determinada energia, o processo de absorção dos fótons pelo efeito fotoelétrico ocorre com maior probabilidade nos átomos mais pesados (KAPLAN, 1997).

No entanto, à medida que a energia dos fótons aumenta, diminui a probabilidade de ocorrência do efeito fotoelétrico e aumenta a probabilidade de ocorrência do efeito Compton. Nele, os fótons incidentes são espalhados pelos elétrons dos átomos, geralmente mais fracamente ligados, e por este motivo considerados livres. Parte da energia do fóton incidente é transferida para o elétron para arrancá-lo do átomo, de modo que o fóton espalhado irá possuir menor energia do que o fóton incidente. O espalhamento entre o fóton e o elétron pode se dar em diferentes ângulos, de modo que tanto a energia cinética do elétron espalhado quanto do fóton será variável após interação.

No intervalo de energia em que o efeito Compton é dominante, a energia do fóton incidente é muito maior do que a energia de ligação dos elétrons ligados aos átomos. O processo de interação neste caso está relacionado ao espalhamento dos

fótons por um elétron livre ou fracamente ligado, inicialmente em repouso, desde que cada elétron no átomo espalha independentemente. A probabilidade de ocorrência do efeito Compton (σ_{eC}) é proporcional ao número atômico Z (CULLITY, 1978; KAPLAN, 1997) e dada por (Equação 2.4.4):

$$\sigma_{ec} = \rho N_A \frac{Z}{A} \tau \tag{2.4.4}$$

onde, ρ representa a densidade do material absorvedor, N_A é o número de Avogadro, Z é o número atômico do absorvedor, A é o seu peso atômico e τ é a seção de choque por elétron para a remoção dos fótons do feixe incidente por espalhamento incoerente. Para elementos leves, na faixa de energia em que o efeito Compton é dominante, o coeficiente de atenuação linear torna-se praticamente constante.

Para fótons mais energéticos (E>10 MeV), o efeito dominante é o processo de produção de pares. Para energias acima de aproximadamente 1,02 MeV, um par elétron-pósitron é formado quando o fóton interage com o campo de Coulomb originário do núcleo do átomo. Um par de partículas com cargas opostas precisa ser formado para que a carga total seja conservada. Se a energia do fóton exceder 1,02 MeV, o mínimo necessário para a criação do par de partículas (elétron-pósitron), o restante será dividido entre o par formado na forma de energia de movimento (GRIEKEN, 2001). A energia cinética desse par formado é dada por (KAPLAN, 1997) (Equação 2.4.5):

$$T = h\nu - 2m_0 c^2 \tag{2.4.5}$$

A probabilidade de ocorrência do efeito produção de pares (σ_{pp}) é dado por (Equação 2.4.6):

$$\sigma_{pp} = \frac{Z^2}{137} \left(\frac{e^2}{m_0 c^2}\right)^2 \tag{2.4.6}$$

onde, Z é o número atômico, m_0c^2 é a energia de repouso do elétron, *e* representa a carga do elétron e 137 é a constante da estrutura fina.

Porém, é importante salientar que o uso do coeficiente de atenuação linear é limitado, pelo fato deste parâmetro variar com a densidade do material absorvedor, mesmo que este possua a mesma composição molecular. Por exemplo, quando o material com a mesma composição molecular estiver em diferentes estados da matéria (sólido, líquido ou gasoso), possuirá diferentes valores de μ (CULLITY, 1978). Portanto, para evitar a variação de μ com a densidade do material absorvedor, define-se um novo parâmetro conhecido por coeficiente de atenuação de massa:

coeficiente de atenuação de massa =
$$\frac{\mu}{\rho} \left(\frac{cm^2}{g} \right)$$

onde, ρ é a densidade do material absorvedor. Portanto, para uma dada energia, o coeficiente de atenuação de massa não mudará com variações no estado físico do material estudado. Para compostos e misturas, o coeficiente de atenuação poderá ser calculado pela regra da mistura. O cálculo se dá a partir da média ponderada entre o coeficiente de atenuação de massa (cada elemento químico) e as frações dos pesos moleculares de cada elemento constituinte do material (CULLITY, 1978) (Equação 2.4.7):

$$\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_c = \sum_i \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i w_i \tag{2.4.7}$$

onde, $\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i$ é o coeficiente de atenuação do *i-ésimo* elemento e w_i é a fração de peso do *i-ésimo* elemento do composto ou mistura.

A Figura 2.4.1 traz um exemplo de curvas do coeficiente de atenuação de massa, μ/ρ , em função da energia para os três efeitos parciais (efeito fotoelétrico, efeito Compton e produção de pares) descritos anteriormente e a curva de μ/ρ total para o óxido de Fe (Fe₂O₃).

Figura 2.4.1 - Coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ) do óxido de ferro (Fe₂O₃) em função da energia dos fótons (E), para os diferentes efeitos parciais (efeito fotoelétrico, efeito Compton e produção de pares) de interação da radiação e para o μ/ρ total (considera a soma de todos os efeitos parciais. As áreas hachuradas correspondem às faixas de energia de dominância de cada efeito).



Fonte: A autora.

Pode-se observar que na faixa de energia que vai de 10^{-3} MeV até aproximadamente 0,1 MeV o efeito fotoelétrico é o efeito dominante. A curva possui um decaimento acentuado e é nesta região que μ/ρ apresenta os maiores valores em função da dependência desse efeito com Z. A partir de 0,2 MeV até aproximadamente 10 MeV, o efeito dominante é o efeito Compton. Podemos observar que a curva possui um decaimento praticamente constante com o aumento da energia, devido a dependência linear do efeito Compton com Z. Já a produção de pares começa a dominar a partir de 10 MeV, mesmo que a energia necessária para que esse efeito comece a ocorrer seja aproximadamente dez vezes menor (1,02 MeV). A curva de μ/ρ para a produção de pares apresenta aumento em virtude da dependência desse efeito com Z².

Na curva de µ/p total é possível notar a junção das três curvas dos efeitos parciais de interação. A curva se assemelha muito à curva do efeito fotoelétrico, principalmente para as menores energias dos fótons. É possível observar ainda a existência de uma descontinuidade apresentada pela curva nas regiões de menores

energias, a qual se deve a interação fotoelétrica com os elétrons da camada K (borda de absorção K). A borda de absorção K (K-edge) refere-se ao aumento abrupto na absorção fotoelétrica de fótons de raios X observado em um nível de energia logo acima da energia de ligação dos elétrons da camada K do átomo absorvedor. Quanto maior o número atômico da molécula ou quanto maior a abundância de moléculas com números atômicos maiores, mais acentuada será essa descontinuidade.

A Tabela 2.4.1 traz a porcentagem dos efeitos dominantes de acordo com algumas energias selecionadas no intervalo de 0,1 MeV até 12,0 MeV.

Energia (MeV)	Efeito fotoelétrico	Efeito Compton	Produção de pares
0,10	47%	44%	0%
0,15	23%	69%	0%
1,25	0%	99%	1%
12,0	0%	47%	51%

Algumas porcentagens apresentadas não fecham 100% por conta do efeito Rayleight, não abordado neste trabalho.

2.5 PROGRAMA XCOM

Os valores do coeficiente de atenuação, além de serem utilizados em determinações de propriedades físicas do solo (como por exemplo, porosidade, densidade, umidade) são também empregados no cálculo de parâmetros de interação da radiação. As seções de choque são proporcionais à probabilidade de interação dos fótons com as moléculas, átomos e elétrons do material estudado. Sendo assim, a seção de choque molecular, a qual está relacionada com as moléculas que compõe o material estudado, será determinada pela seguinte equação (FERREIRA et al., 2018) (Equação 2.5.1):

$$\sigma_M = \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{M}{N_A} \right) \tag{2.5.1}$$

onde, $M = \sum_{i} n_{i}A_{i}$ representa o peso molecular do material analisado, A_{i} é o peso atômico do *i*th elemento, n_{i} o número de fórmulas unitárias da molécula e N_{A} é o número de Avogadro. O parâmetro σ_{M} possui relação linear com μ/ρ , como pode ser observado na Figura 2.5.1.

Figura 2.5.1 - Relação existente entre a seção de choque molecular (σ_M) e o coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ).



Fonte: A autora.

A seção de choque atômica está relacionada com a probabilidade de interação dos fótons com os átomos que o compõe o material absorvedor. Esse parâmetro físico pode ser calculado por meio da seguinte relação (Equação 2.5.2):

$$\sigma_A = \frac{\sigma_M}{\sum_i n_i} \tag{2.5.2}$$

onde, $\sum_i n_i$ é o número total de unidades de fórmula do composto, obtido através da multiplicação do número unitário de fórmulas com a quantidade de átomos que compõe a molécula.

O parâmetro σ_A assim como σ_M , também apresenta relação linear com μ/ρ , uma vez que a seção de choque atômica é diretamente proporcional a seção de choque molecular (Figura 2.5.2).

Figura 2.5.2 - Relação existente entre a seção de choque atômica (σ_A) e o coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ).



Fonte: A autora.

Já a seção de choque eletrônica, corresponde a probabilidade de ocorrência da interação dos fótons com os elétrons que constituem um determinado absorvedor, sendo obtida a partir da seguinte relação (PIRES, 2018) (Equação 2.5.3):

$$\sigma_E = \frac{1}{N_A} \sum \frac{f_i A_i}{Z_i} \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i \tag{2.5.3}$$

onde, $f_i = \frac{n_i}{\sum_j n_j}$ representa a abundância fracional, que também pode ser referida como fração molar, podendo ser utilizado para o seu cálculo a porcentagem de átomos na molécula. O parâmetro $\sum_j n_j$ é o número total de átomos presentes na fórmula molecular, Z_i é o número atômico do *i*th elemento constituinte, A_i é a massa atômica e $\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i$ é o coeficiente de atenuação de massa de cada elemento.

O parâmetro σ_E , assim como σ_M e σ_A , também apresenta relação linear com μ/ρ , conforme exemplificado na Figura 2.5.3.

Figura 2.5.3 - Relação existente entre a seção de choque eletrônica (σ_E) e o coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ).



Fonte: A autora.

O número atômico efetivo tem como objetivo substituir todos os átomos do composto por um único átomo possuindo um número atômico efetivo. Seus valores são obtidos a partir da seguinte equação (DEMIR et al., 2013) (Equação 2.5.4):

$$Z_{eff} = \frac{\sigma_A}{\sigma_E} \tag{2.5.4}$$

Já a densidade eletrônica é obtida a partir da seguinte relação (Equação 2.5.5):

$$N_{el} = \frac{\mu/\rho}{\sigma_E} \tag{2.5.5}$$

O programa XCOM utiliza como entrada de dados os valores das porcentagens de elementos químicos (ou óxidos) do material estudado, que pode ser uma molécula, um composto ou uma mistura. A faixa de energia pode ser fixada, entretanto o intervalo de energia no *default* do programa varia de 1 keV até 100 GeV. Ainda, dentro do intervalo selecionado, é possível inserir energias específicas de fótons, como no caso do presente trabalho, no qual foi utilizada a energia do fóton gama da fonte radioativa de ²⁴¹Am (≈60 keV). Outras fontes cujas energias dos fótons são interessantes envolvem as fontes radioativas de ⁶⁰Co, ¹³³Ba e ¹³⁷Cs.

Neste estudo, a faixa de energia selecionada foi de 1 keV a 100 MeV, dando ênfase a energia de 59,5 keV, que corresponde à fonte de ²⁴¹Am. Essa fonte

radioativa é uma das mais utilizadas em pesquisas de medidas de propriedades físicas do solo pela técnica de atenuação de raios gama (TECH et al., 2022; PIRES et al., 2020; PIRES, 2018; SAYYED et al., 2018; BORGES et al., 2012; MEDHAT, 2012, PIRES et al., 2011; DEMIR et al., 2008; PIRES et al., 2005). Esta energia específica dos fótons foi utilizada para fins de comparação entre os métodos utilizados analisados (EDXRF e WDXRF) em função da importância dos valores obtidos nesta energia. Os dados de entrada da composição química do solo, em formato de óxidos, obtidos por EDXRF e WDXRF, foram usados na obtenção dos coeficientes de atenuação de massa considerando o espalhamento coerente (espalhamento Rayleigh).

Simulações pelo XCOM

Como uma forma de visualizar os resultados que podem ser obtidos com o programa XCOM, esta seção apresenta alguns exemplos de parâmetros de interação a partir de simulações baseadas na composição química do solo. Para verificar possíveis variações nos parâmetros de interação foram simulados valores extremos dos óxidos majoritários (SiO₂, Al₂O₃, Fe₂O₃ e TiO₂) que podem ser encontrados em solos tropicais.

A Tabela 2.5.1.1 traz a composição química de solos simulados e os possíveis impactos dessas composições nos parâmetros de interação da radiação. Comparando os resultados para os parâmetros entre as concentrações máximas de SiO₂ e Al₂O₃ (Tabela 2.5.1), podemos observar que a concentração máxima do Al₂O₃ apresentou os menores valores para todos os parâmetros analisados. Entretanto, para o parâmetro Z_{eff} a concentração máxima de Al₂O₃ não mostrou diferença com a concentração máxima de SiO₂. Isto porque os elementos AI e Si possuem número atômicos muito próximos (Z_{AI}=13, Z_{Si}=14).

Composição de óxidos (%)		(%)	Parâmetro			
SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	TiO ₂	μ/ρ (cm² g⁻¹)		
70	10	10	10	0,349		
10	70	10	10	0,340		
10	10	70	10	0,750		
10	10	10	70	0,750		
σ _M (barn/molécula)						
70	10	10	10	4,65x10 ²		
10	70	10	10	4,53x10 ²		
10	10	70	10	9,98x10 ²		
10	10	10	70	1,40x10 ³		
σ _A (barn/átomo)						
70	10	10	10	12,4		
10	70	10	10	12,3		
10	10	70	10	35,1		
10	10	10	70	22,2		
σ _E (barn/elétron)						
70	10	10	10	1,20		
10	70	10	10	1,18		
10	10	70	10	2,67		
10	10	10	70	1,87		
Zeff						
70	10	10	10	10,40		
10	70	10	10	10,40		
10	10	70	10	13,20		
10	10	10	70	11,90		
$N_{el} (x10^{23} \text{ elétrons } g^{-1})$						
70	10	10	10	2,90		
10	70	10	10	2,87		
10	10	70	10	2,81		
10	10	10	70	2,80		

Tabela 2.5.1 - Valores de composição química elementar dos óxidos majoritários do solo (SiO₂, Al₂O₃, Fe₂O₃, TiO₂) e suas influências nos parâmetros de interação da radiação (μ/ρ , σ_M , σ_A , σ_E , Z_{eff}, N_{el}).

Para as concentrações máximas de Fe₂O₃ e TiO₂, podemos observar que μ/ρ e N_{el} não apresentaram diferenças, apesar do elemento Fe (Z=26) possuir número atômico maior do que o elemento Ti (Z=22). A concentração máxima de TiO₂ mostrou valores mais elevados apenas para a seção de choque molecular, σ_M . Para as demais seções de choque, σ_A e σ_E , a maior concentração de Fe₂O₃ também influenciou nos maiores valores desses parâmetros.

Esta simulação mostra a importância de estudos e análises baseadas nas seções de choque (σ_M , $\sigma_A e \sigma_E$). Geralmente, os trabalhos existentes na literatura científica para os parâmetros de interação da radiação trazem somente os resultados de propriedades como μ/ρ , Z_{eff} e N_{el} . Entretanto, alguns desses parâmetros muitas vezes não se mostram sensíveis a variações na composição

química do solo, enquanto que as seções de choque, como no exemplo de valores extremos aqui simulados, se mostraram sensíveis para para diferenciar diferentes tipos de solos.

2.6 SIMULAÇÕES DE MONTE CARLO

GEANT4 code

O GEANT4 traz um pacote de ferramentas que permite a criação de aplicativos para simulações baseadas no método de Monte Carlo, envolvendo a interação de partículas com a matéria. A simulação é programada em linguagem C++. A chave de classe para as simulações é a *G4RunManager* que controla a geometria, os processos físicos de interação (a partir de 250 eV) e a geração das partículas (MEDHAT; WANG, 2013).

A simulação é dependente da geometria do feixe de fótons colimado, e podem ser utilizados fótons de diferentes energias. A montagem "experimental" da simulação consiste em um feixe de fótons monoenergéticos incidindo numa determinada amostra de interesse. O coeficiente de atenuação de massa é então determinado pela Lei de Beer-Lambert (Equação 2.4.1) (MEDHAT, 2015).

A espessura da amostra é definida de acordo com a energia dos fótons incidentes. Segundo Pires (2018), a espessura da amostra deve ser menor ou igual a um livre caminho médio, a fim de se evitar a influência de fótons espalhados (secundários). O livre caminho médio diz respeito a distância percorrida pela partícula entre interações. A espessura ótima da amostra tende a aumentar com o aumento da energia incidente. Costa et al. (2013) encontraram como espessura ótima para a fonte de ²⁴¹Am valores menores do que 4 cm e para a fonte de ¹³⁷Cs maiores do que 10 cm.

O intervalo de energia dos fótons na simulação pode variar de 1 keV a 100 GeV. O coeficiente de atenuação é então calculado a partir da simulação de todos os processos e interações físicas relevantes (efeito fotoelétrico, efeito Compton e produção de pares) (MEDHAT; WANG, 2013). A Figura 2.6.1 traz um exemplo de uma montagem "experimental" simulada utilizando o GEANT4.

Figura 2.6.1 - Esquema de montagem teórico-experimental para aquisição dos valores do coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ) por meio do método baseado na simulação de Monte Carlo (GEANT4).



Fonte: Adaptado de Medhat (2015).

Fluka code

O Fluka code é um pacote de rotinas integradas de uso geral para o cálculo, através do método computacional de Monte Carlo, do transporte e interação de partículas com a matéria. O programa é escrito usando linguagem FORTRAN77. Este código tem sido implementado em diversas áreas de pesquisa como física aplicada a solos (MEDHAT et al., 2014), vidros (SOMAILI et al., 2021; ELAZAKA et al., 2021), em estudos de proteção radiológica (BASU et al., 2021), materiais de construção (DEMIR et al., 2013), entre outros. Há mais de 60 partículas que podem ter suas interações eletromagnéticas, hadronicas e nucleares descritas pelo Fluka code (SOMAILY et al., 2021) (Figura 2.6.2).

Figura 2.6.2 - Esquema de uma montagem experimental utilizada para extrair medidas de μ/ρ em uma simulação utilizando o Método de Monte Carlo no Fluka Code.



Fonte: Adaptado de Medhat et al. (2014).

O Fluka code estima o coeficiente de atenuação de massa por meio da obtenção do número de fótons incidentes e o número de fótons transmitidos pelo material absorvedor. Para isto, faz-se necessário informações sobre a densidade do absorvedor e sua composição química (ABOUHASWA et al., 2021). Para erros <1%, é sugerido um fluxo inicial de 10 a 20 milhões de fótons (ELAZAKA et al., 2021). O código Fluka também fornece um arquivo sobre o tipo de feixe a ser utilizado, de modo a permitir escolher o tipo de partícula e energia dos fótons/partículas (SHARMA et al., 2019).

REFERÊNCIAS

ABOUHASWA, A. S. et al. Synthesis, physical, optical, mechanical, and radiation attenuation properties of TiO₂-Na₂O-Bi₂O₃-B₂O₃ glasses. **Ceramics International**, v. 47, p. 185-204, 2021.

BASU, P.; SARANGAPANI, R.; VENKATRAMAN, B. Na improvement to the Kalo's formula for double layer gamma ray exposure buildup factors for shielding materials of nuclear and radiological facilities. **Annals of Nuclear Energy**, v.151, p. 107944, 2021.

BORGES, J. A. R.; PIRES, L. F.; PEREIRA, A. B. Computed tomography to estimate the representative elementar área for soil porosity measurements. **The Scientific World Journal**, v. 2012, p. 526380, 2012.

COSTA, J. C.; BORGES, J. A. R.; PIRES, L. F. Soil bulk density evaluated by gamma-ray attenuation: Analysis of system geometry. **Soil & Tillage Research**, v. 129, p. 23-31, 2013.

CULLITY, B. D. **Elements of X-Ray Diffraction**. Massachusetts: Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1956.

DEMIR, D. et al. Determination of photon attenuation coefficient, porosity and field capacity of soil by gamma-ray transmission for 60, 356 and 662 keV gamma rays. **Applied Radiation and Isotopes**, v. 66, p. 184-187, 2008.

DEMIR, D.; TURSUCU, A. Measurement of the effective atomic number of Fe_xCr_{1-x} and Fe_xNi_x alloys using scattering of gamma rays. **Journal of Alloys and Compounds**, v. 581, p. 213-216, 2013.

EISBERG, R., RESNICK, R. Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas. Elsevier, 1979.

ELAZAKA, A. I. et al. New approach to removal of hazardous Bypass Cement Dust (BCD) from the environment: 20Na2O-20BaCl₂-(60x)B₂O₃-(x)BDC glass system and shielding competences. **Journal of Hazardous Materials**, v. 403, p. 123738, 2021.

EMBRAPA. **Manual de Métodos de Análise de Solo**. 2^a ed. Rio de Janeiro: Centro Nacional de Pesquisa de Solos, 1997.

FERREIRA, T. R. et al. Surface liming effects on soil radiation attenuation properties. **Journal of Soils and Sediments**, v. 18, p. 1641-1653, 2018.

GRIEKEN, R. E., MARKOWICZ, A. A. **Handbook of X-Ray Spectrometry**. 2^a ed. Marcel Dekker, Inc., 2001

HILLEL, D. Introduction to environmental soil physics. USA: Elsevier Science, 1998.

KAPLAN, I. Nuclear Physics. Boston: Addison-Wesley Publishing Company, 1997.

KER, J. C., CURI, N., SCHAEFER, C. E. G., J. TORRADO-VIDAL. **Pedologia Fundamentos**. Sociedade Brasileira de Ciência do Solo, 2012.

KNOLL, G. F. Radiation and detection measurements. John Wiley & Sons Inc, Hoboken, 2010.

LESCH, I. F. Formação e Conservação dos Solos. 2ª ed. São Paulo: Oficina de Textos, 2010.

LIBARDI, P. L. Dinâmica da Água no Solo. EDUSP, 2005.

MEDHAT, M. E. Application of gamma-ray transmission method for study the properties of cultivated soil. **Annals of Nuclear Energy**, v. 40, p. 53-59, 2012.

MEDHAT, M. E. Comprehensive study of photon attenuation through different construction matters by Monte Carlo Simulation. **Radiation Physics and Chemistry**, v. 107, p. 66-74, 2015.

MEDHAT, M. E.; WANG, Y. Geant4 code for simulation attenuation of gamma rays through scintillation detectors. **Annals of Nuclear Energy**, v. 62, p. 316-320, 2013.

MEDHAT, M. E. et al. Calculation of gamma-ray mass attenuation coefficients of some Egyptian soil samples using Monte Carlo methods. **Radiation Effects & Defects in Solids**, v. 169, p. 706-714, 2014.

PERCHARSKY, V. K.; ZAVALIJ P. Y. Fundamentals of Poeder Diffraction and Structural Characterization of Materials. 2^a ed. Springer, 2005.

PIRES, L. F. Soils analysis using nuclear techniques: a literature review of the gamma ray attenuation method. **Soil and Tillage Research**, v. 184, p. 216-234, 2018.

PIRES, L. F.; BACCHI, O. O. S.; REICHARDT, K. Soil water retention curve determined by gamma-ray beam attenuation. **Soil & Tillage Research**, v. 82, p. 89-97, 2005.

PIRES, L. F. et al. Gamma-ray attenuation method as na eficiente tool to investigate soil bulk density spatial variability. **Annals of Nuclear Energy**, v. 36, p. 1734-1739, 2009.

PIRES, L. F. et al. Non-destructive image analysis of soil surfasse porosity and bulk density dynamics. **Radiation Physics and Chemistry**, v. 80, p. 561-566, 2011.

PIRES, L. F. et al. X-Ray microtomography analysis of pore soil structure dynamics under wetting and drying cycles. **Geoderma**, v. 362, p. 103-114, 2020.

PRANDEL, L. V. et al. Characterization of kaolinite in the hardsetting clay fraction using atomic force microscopy, X-ray diffraction, and the Rietveld method. **Journal of Soils and Sediments**, v. 17, p. 2144-2155, 2017.

PRANDEL, L. V. Integração de Métodos de Caracterização Mineralógica de Solos Cauliníticos. Tese (Doutorado em ciências – Área de concentração: Física) Universidade Estadual de Ponta Grossa, Ponta Grossa, 2015.

SANTOS, H. D. et al. Sistema Brasileiro de Classificação de Solos. 5ª ed. EMBRAPA, 2018.

SAYYED, M. I. et al. Evaluation of radiation absorption capacity of some soil samples. **Radiochimica Acta**, v. 107, p. 1-11, 2018.

SERWAY, R. A.; MOSES, C. J.; MOYER, C. A. **Modern Physics**. 3^a ed. Thompson Learning Inc, 2005.

SOMAILY, H. H. et al. The effects of V₂O₅/K₂O substitution on linear and nonlinear optical properties and the gamma ray shielding performance of TVK glasses. **Ceramics International**, v. 47, p. 1012-1020, 2021.

SHARMA A. et al. Simulation of shielding parameters for TeO₂-WO₂ glasses using FLUKA code. **Results in Physics**, v. 13, p. 102199, 2019.

TECH, L. T. et al. Radiation Attenuation Processes: the Role of Clay Porous Media. **Philippine Journal of Science**, v. 151, p. 823-832, 2022.

VAN LIER, Q. J. **Física do Solo**. 1^a ed. Viçosa MG: Sociedade Brasileira de Ciência do Solo, 2010.

YANAGUISAWA, V. A. **Caracterização Mineralógica de um Neossolo Flúvico por Técnicas de Espectroscopia, Microscopia e Difração de Raios X**. tese (Mestrado em Ciências – Área de concentração: Física) Universidade Estadual de Ponta Grossa, Ponta Grossa, 2019.

3 CARACTERIZAÇÃO ELEMENTAR E TEÓRICO-EXPERIMENTAL DOS PARÂMETROS DE INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO DE UM CAMBISSOLO DO PARQUE ESTADUAL DA SERRA DOURADA

RESUMO

O Parque Estadual da Serra Dourada (PESD) está localizado em uma área de Unidade de Conservação, no Estado de Goiás, criado com o objetivo de proteção da biodiversidade, de nascentes, mananciais, fauna, flora e belezas naturais da região. Os inúmeros estudos disponíveis na literatura científica, que tratam de propriedades físicas do solo utilizando técnicas com o uso de fontes radioativas, geralmente se restringem a análise de parâmetros como o coeficiente de atenuação e grandezas derivadas como a densidade e umidade. No entanto, não existem relatos de estudos que abordem as propriedades de atenuação da radiação em solos de unidade de conservação e com pouca intemperização. O objetivo deste estudo foi analisar parâmetros de interação da radiação de diferentes horizontes (A: 0-13; AB: 13-30; Bi: 30-80; C: 80-127 cm) de um Cambissolo, localizado na unidade de conservação PESD. Para a condução do estudo foram obtidos dados da composição de óxidos dos horizontes por meio de dois métodos de fluorescência, por dispersão de energia (EDXRF) e dispersão de comprimento de onda (WDXRF), a fim de comparar os resultados obtidos entre eles. O coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ) foi obtido por meio de simulação computacional utilizando os programas XCOM, GEANT4 e Fluka. Com base nos dados de μ/ρ (XCOM) foram calculados os demais parâmetros: seções de choque molecular (σ_M), atômica (σ_A), eletrônica (σ_E), número atômico efetivo (Zeff) e densidade eletrônica (Nel). Os resultados indicam que ambas as técnicas de obtenção do conteúdo de óxidos se mostraram eficientes na detecção dos teores dos óxidos, entretanto a WDXRF apresentou maior sensibilidade. O Fe₂O₃ foi o óxido que mostrou maior influência nos parâmetros μ/ρ , σ_A e σ_E . O Z_{eff} e a Nel não apresentaram relação com nenhum dos óxidos mais abundantes (SiO₂, Al₂O₃, Fe₂O₃ e K₂O), porém as curvas desses parâmetros, no intervalo de variação da energia estudado (10 keV até 100 MeV), mostram melhor distinção entre si, quando comparados aos demais parâmetros. O Zeff não mostrou diferenças significativas entre os horizontes do solo, entretanto apresentou diferença significativa entre os métodos de FRX, mostrando ser um parâmetro sensível a variações na composição química do solo. Já σ_M não apresentou relação alguma considerando os óxidos majoritários, entretanto se mostrou ser mais sensível com as mudanças na composição química do solo em comparação com os demais parâmetros. Estes resultados levantaram novas discussões acerca dos valores obtidos dos parâmetros de interação da radiação e os óxidos majoritários dos solos, dado que os parâmetros analisados são sensíveis a mudanças significativas na composição química do solo. Também apresentaram novas discussões acerca da obtenção de µ/p pelos métodos de simulação computacional. Além de que este Cambissolo é oriundo de uma unidade de conservação. Estes resultados de composição química e análise dos parâmetros em função dela, podem vir a servir de referência para trabalhos posteriores com solos de mesma classificação e da região ao redor do PESD, que foram submetidos a ações antrópicas.

Palavras chave: Parque Estadual da Serra Dourada, WDXRF, EDXRF, seção de choque, Cambissolo, coeficiente de atenuação de massa.

ABSTRACT

The Serra Dourada State Park (PESD) is located in a conservation unit área in the State of Goiás, created aiming the biodiversity, springs, fauna, flora and natural beauty protection in the region. The numerous studies available in the scientific literature, which deal with soil physical properties using techniques with the use of radioactive sources, are generally restricted to the analysis of parameters such as the attenuation coefficient and derived quantities such as density, moistures, etc. however, there are no reports of studies that approach radiation attenuation properties of soils in conservation units (theoretically protected from anthropic actions) and poorly weathered. The objective of this study was to analyze the radiation interaction parameters from different horizons (A: 0-13, AB: 13-30, Bi: 30-80, C: 80-127 cm) of a Cambisol, located in the PESD conservation unit. To conduct this study, data on the composition oxides of the horizons were obtained between them. For the determination of the oxide contents, the techniques of X ray fluorescence by energy dispersion (EDXRF) and by wavelength (WDXRF) were used. The mass attenuation coefficient was obtained through computer simulation using the programs XCOM, GEANT4 and Fluka. Based on the data, the remaining parameters were calculated: molecular (σ_M), atomic (σ_A) and electronic (σ_E) cross sections, effective atomic number (Z_{eff}) and electronic density (N_{el}). The results indicate that both techniques for obtaining the oxide content proved to be efficient in detecting the major oxide content, however the WDXRF showed greater sensitivity. The Fe₂O₃ oxide content showed the greatest influence on the parameters μ/ρ , σ_A and σ_E . The effective atomic number and electron density were not related to any of the most abundant oxides (SiO₂, Al₂O₃, Fe₂O₃, K₂O), but the curves of these parameters, in the studied energy range variation (1 keV – 100 MeV), showed better distinction between the curves, when compared to the other parameters. The effective atomic number did not show significant differences between the XRF methods, being a sensitive parameter to variations in the chemical composition of the soil. On the other hand, did not showed any relationship considering the major oxides, however it proved to be more sensitive to changes in soil chemical composition compared to the other parameters. These results highlighted new discussions about the major oxides of the soils, given that that analyzed parameters are sensitive to significant changes in the chemical composition of the soil. They also presented new discussions about the obtaining (μ/ρ) of the by computer simulation methods. These results of chemical composition and analysis of the parameters depending on it, may serve as a reference for later works with soils of the same classification and in h region around the PESD, which were subjected to anthropic actions.

Key words: Serra Dourada State Park, X ray fluorescence, cross sections, Cambisol, mass attenuation coefficient.

3.1 INTRODUÇÃO

As áreas chamadas de Unidades de Conservação são criadas com o objetivo de proteger territórios de modificações intensas e impactos ambientais, buscando minimizar a degradação de meio ambiente causada pelo uso indevido da terra e exploração da vegetação natural. Essas áreas constituem elementos vitais para a proteção ambiental, auxiliando na manutenção da biodiversidade com o objetivo de proteger a flora e a fauna, a fim de manter ecossistemas fundamentais intocados. Com esse intuito, o Parque Estadual da Serra Dourada (PESD) foi criado em 5 de junho de 2003, pelo decreto 5.768, por meio de consultas públicas com a participação da Agência Goiana do Meio Ambiente e Secretaria Estadual do Meio Ambiente e Recursos Hídricos (BARBOSA, 2008).

A criação do parque teve como principal finalidade a preservação de nascentes, mananciais, flora, fauna e belezas naturais da região. Com o objetivo de também controlar a ocupação do solo na região e conciliar a proteção do meio ambiente com atividades científicas, econômicas e sociais, o parque visa propiciar atividades voltadas para a implementação do ecoturismo sustentável, educação ambiental e conscientização sobre a conservação do meio ambiente (BARBOSA, 2008).

Os solos da região do Cerrado são bastante variáveis quanto a classificação, e a paisagem, geralmente é monótona. Os solos da formação do Grupo Araxá são caracterizados pela alta atividade de erosão, com relevo bastante movimentado (MOTTA et al., 2002). A formação Araxá está compreendida na Bacia Sedimentar do Paraná e segundo levantamentos científicos (SIMÕES, 1984), a Serra Dourada de Goiás se insere nas faixas de dobramentos do ciclo brasiliano (cinturões orogênicos), constituem-se de alinhamentos de cristais, são estreitas e alongadas e sustentadas por rochas metamórficas, sobretudo quartzitos (BARBOSA, 2008).

Na região do PESD, os solos predominantes são os Cambissolos. Esses solos, de acordo com o Sistema Brasileiro de Classificação de Solos (SANTOS et al., 2018), são pouco desenvolvidos e caracterizados pela presença de horizonte B incipiente, adjacente aos horizontes mais superficiais. Possuem a característica de alteração química e física em grau não muito avançado, porém o suficiente para o desenvolvimento de cor ou de unidades estruturais e ausência da estrutura da rocha de origem em 50% ou mais de seu volume. As características morfológicas, como

cor, textura e profundidade dos Cambissolos variam conforme as condições climáticas, material de origem e formas de relevo, tendo nesta classe, solos fortemente ou imperfeitamente drenados, de rasos a profundos, entre outras características físico-químicas (SANTOS et al., 2018).

Existem inúmeros estudos na literatura científica, a respeito das propriedades físicas do solo em diferentes escalas (microscópica a macroscópica), utilizando técnicas experimentais baseadas no uso de fontes radioativas e de raios X e simulação computacional de parâmetros de interação da radiação (ELAZAKA et al., 2021; CAMARGO et al., 2021; PRANDEL et al., 2021; FERREIRA et al., 2018; PIRES, 2018; APPOLONI; RIOS, 1994; CRESTANA et al., 1986). A maioria destes estudos visa entender processos que ocorrem no sistema solo, como aqueles relacionados com a retenção e movimento de água (PIRES et al., 2006; PIRES et al., 2005; BACCHI et al., 1998), compactação, erosão, selamento superficial (PIRES et al., 2008; TIMM et al., 2006; TIMM et al., 2005; LAL; SHUKLA, 2004; WENDROTH et al., 2003). No entanto, ainda existem poucos estudos que exploram os processos de interação da radiação em solos tropicais (PIRES et al., 2020; FERREIRA et al., 2018), e inexistem estudos em solos tropicais pouco intemperizados.

Geralmente, os estudos reportados na literatura, utilizando métodos experimentais com fontes radioativas e simulação computacional, se concentram na análise de solos de distintas classes texturais ou então submetidos a diferentes usos. São praticamente inexistentes investigações detalhadas em uma determinada classe de solo, especialmente com ênfase na análise de seus horizontes (MEDHAT; PIRES, 2016; COSTA et al., 2014; KUCUK et al., 2013). A caracterização do solo, por intermédio dos parâmetros de interação da radiação, concentra-se em sua maioria a áreas submetidas à ação antrópica; de modo que esses parâmetros irão refletir as modificações ocasionadas na composição química do solo devido ao seu uso (APPOLONI; RIOS, 1994; MEDHAT et al., 2014; FERREIRA et al., 2018).

Desta forma, o estudo dos parâmetros de interação da radiação, em solos que ainda não sofreram ação antrópica, pode fornecer índices para a caracterização desses solos em áreas que podem ser utilizadas como referência. Esses valores de referência podem, por exemplo, ser utilizados em análises futuras na caracterização dos diferentes horizontes do solo; e quando comparados com áreas submetidas ao revolvimento das camadas superficiais ou que receberam adubação e corretivos, podem ser usados para se verificar o grau de modificação a que o solo foi submetido.

Entre os parâmetros de interação da radiação utilizados na caracterização do solo destacam-se o coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ), as seções de choque molecular (σ_M), atômica (σ_A), eletrônica (σ_E), o número atômico efetivo (Z_{eff}) e a densidade eletrônica (N_{el}). Esses parâmetros ajudam a entender como ocorrem a absorção e o espalhamento de fótons em materiais multielementares, como é o caso do solo. O coeficiente de atenuação linear (μ) mede quão fortemente um determinado elemento ou composto absorve ou espalha a radiação por unidade de comprimento (KAPLAN, 1997).

Existem diferentes metodologias para a obtenção de µ/p de um elemento ou composto. A técnica de atenuação de raios gama é empregada quando medidas experimentais são necessárias (PIRES, 2018). É importante salientar a existência de métodos de obtenção de µ/p baseados em modelagem e simulações computacionais usando o método de Monte Carlo (MEDHAT et al., 2014) e a regra da mistura (programa XCOM) (MEDHAT, 2011). O último é um método já bem estabelecido empregado com frequência na comparação de resultados experimentais e teóricos (simulados) de μ/ρ de diferentes tipos de materiais (ELAZAKA et al., 2021; TEKIN et al., 2020; MEDHAT, 2015).

As diferentes seções de choque estão relacionadas com a medida da probabilidade de que os fótons interajam com a matéria por processos específicos. O número atômico efetivo representa o número total de elétrons ao redor dos núcleos dos átomos que constituem o solo ao passo que a densidade eletrônica está relacionada com a probabilidade de se encontrar os elétrons em locais específicos do material absorvedor (KAPLAN, 1997). Esses parâmetros de interação da radiação são obtidos a partir de medidas representativas de µ/p e sofrem influência direta da composição química do solo.

O objetivo geral deste capítulo foi determinar e caracterizar teoricamente, por meio do programa XCOM, os parâmetros de interação da radiação (μ/ρ , σ_M , σ_A , σ_E , Z_{eff} e N_{el}) para os diferentes horizontes (A, AB, Bi, C) de um Cambissolo oriundo de uma unidade de conservação. Também foi analisado se diferentes métodos de medida da composição elementar do solo (por fluorescência de raios X) podem afetar as determinações dos parâmetros de interação. A partir da análise elementar, obtida por dois métodos distintos (EDXRF e WDXRF), foi possível realizar os cálculos dos parâmetros μ/ρ , σ_M , σ_A , σ_E , Z_{eff} e N_{el} e efetuar a comparação entre os métodos. Como este trabalho visa uma caracterização teórica, foi selecionado um intervalo de energia dos fótons (10 keV a 100 MeV) no qual os parâmetros de interação são mais sensíveis às diferenças na composição de óxidos do solo. Em adição, o capítulo traz mais duas técnicas de obtenção de μ/ρ obtidas pelo método computacional baseado na simulação de Monte Carlo (Fluka e GEANT4). Os valores de μ/ρ obtidos pelo XCOM, por meio do método da WDXRF, foram usados com o intuito de comparação com os métodos de Monte Carlo.

Por fim, além dos objetivos já descritos, o estudo apresentado neste capítulo pretende responder as seguintes hipóteses: 1) parâmetros de interação da radiação apresentam variações mesmo quando a composição química do solo não possui diferenças significativas; 2) solos jovens pouco desenvolvidos (ausência de horizontes bem definidos) apresentam diferenças na composição química do solo e nos parâmetros de interação da radiação ao longo do perfil; 3) os parâmetros de interação da radiação ao longo do perfil; 3) os parâmetros de interação da solo, principalmente naqueles não submetidos à intervenção humana; e 4) mudanças no método de análise química do solo afetam as medidas dos parâmetros de interação da radiação.

3.2 MATERIAIS E MÉTODOS

Solo

O solo estudado é oriundo de uma topossequência identificada na unidade de conservação do Parque Estadual da Serra Dourada, localizado no município de Mossâmedes, Goiás, às coordenadas geográficas: 0587692; 8223465 UTM (Figura 3.2.1). A Serra Dourada apresenta rochas pertencentes à formação geológica do Grupo Araxá (SIMÕES,1984). Segundo Motta et al. (2002), essa formação está associada a uma topografia mais acidentada, em relevo com declives acima de 60%, variando de ondulado a forte ondulado, correspondendo a áreas de dissecação mais recentes. A litologia é formada por micaxistos e quartzitos.

Na estrada de acesso ao PESD, um perfil do solo, situado no topo da serra (Figura 3.2.2), foi classificado por Momoli et al. (2021) como um Cambissolo, de acordo com o Sistema Brasileiro de Classificação de Solos (SANTOS et al. 2018).

Nos horizontes, descrito por meio da classificação morfológica realizada em campo, foram coletadas amostras de solo na região central de cada horizonte do perfil, o qual é constituído de quatro horizontes distintos: A (0-13 cm), AB (13-30 cm), Bi (30-80 cm) e C (80-127 cm). As demais informações morfológicas do perfil encontram-se descritas na Tabela 3.2.1.

Tabela 3.2.1 - Informações sobre a profundidade (Prof.) dos horizontes (Hor.), cor (de acordo com a carta de Munsell), tipo, tamanho e grau da estrutura do Cambissolo estudado.

Hor.	Prof. (cm)	Cor (Munsell)		Estrutura
		Seca	Úmida	Tipo/Tamanho/Grau
А	0-13	5YR 5/2	5YR 3/2	Grumosa/Pequeno/Fraco a
				moderado
AB	13-30	5YR 5/3	5YR 4/3	Bloco
				subangulares/Médio/Moderado
Bi	30-80	5YR 5/4	5YR 4/4	Blocos subangulares/Médio/Forte
С	80-127	5YR 6/4	5YR 4/4	Blocos subangulares/Médio-
				grande/Forte

Fonte: adaptado de Momoli et al. (2021).

O clima na região é classificado como tropical de savana (Cerrado), Aw segundo Köppen, com pluviosidade anual média de 1.695 mm e temperatura média de 24°C, variando entre 10°C e 39°C. O PESD ocupa uma área de 30.000 hectares e foi criado pelo Decreto 5.768, do Governo do Estado de Goiás, com o objetivo de preservar nascentes, mananciais, flora e as belezas naturais, bem como controlar a ocupação do solo na região, conforme já descrito anteriormente (MOMOLI et al., 2021).



Figura 3.2.1 - Distribuição dos pontos de coleta das amostras de solo (V1 a V8) – Parque Estadual da Serra Dourada (PESD). Circulado, a região de coleta do Cambissolo estudado.

Fonte: Renata Santos Momoli (2020).

Figura 3.2.2 - Vista panorâmica da região no ponto de coleta do perfil de solo (esquerda) e imagem contendo a descrição morfológica do perfil V7 (direita). Os termos A, AB, Bi e C indicam os horizontes do perfil do Cambissolo estudado.



Fonte: adaptado de Momoli et al. (2021).

A vegetação no PESD é típica do bioma Cerrado com as fitofisionomias: Cerrado *Strictu-sensu*, Cerradão e Campestre. O Cerrado *Strictu-sensu* está amplamente distribuído no PESD, o Cerradão predomina nos patamares estruturais e a Formação Campestre ocupa o topo aplainado da Serra Dourada, contendo gramíneas e arbustos de pequeno porte e bem espaçados. A variação de altitude no topo da serra se encontra entre 900 e 1.000 m (MOMOLI et al., 2021).

A Serra Dourada é uma elevação alongada no sentido Leste-Oeste, cuja altitude máxima de 1.080 m constitui importante divisor de águas, entre a bacia Araguaia-Tocantins, ao Norte e a bacia do Paranaíba, ao sul. O seu relevo varia de ondulado a fortemente ondulado, com formas similares às *cuestas* e vinculadas a eventos tectônicos, cujo ângulo de mergulho superior à 30° caracteriza o *Hogback* (MOMOLI et al., 2021).

Análises físicas do solo

Após a coleta das amostras de solo, as mesmas foram submetidas às análises de densidade de partículas. A densidade de partículas foi medida pelo método de picnometria a gás no equipamento Quantachrome, modelo MVP-D160. O elemento hélio (He) é o gás recomendado para realizar as medidas, pois sua dimensão atômica permite que os menores poros da amostra sejam preenchidos, na escala de ~1 Angstrom (10⁻¹⁰ m). A densidade de partículas é obtida medindo a diferença de pressão quando uma quantidade conhecida de gás hélio sob pressão passa de um volume de referência V_R, previamente conhecido, para um volume contendo o material sob análise V_C. A equação que rege o equipamento, para as medidas e calibração, é dada por:

$$V_P = V_C - V_R[(P_1/P_2) - 1]$$
(3.2.1)

onde, V_P é o volume do material analisado, V_C \cong 149,4 cm³ é o volume do porta amostra, V_R \cong 89 cm³ é o volume de referência, P₁ é o valor da pressão no volume do porta amostra e P₂ é o valor da pressão do volume de referência.

A densidade de sólidos (partículas) do solo é então encontrada a partir da seguinte equação:

$$\rho_{S} = \frac{m_{S}}{V_{c} - V_{R} \left(\frac{P_{1}}{P_{2}} - 1\right)}$$
(3.2.2)

onde, ps é a densidade de partículas e ms é a massa da amostra de solo.

Para a realização das medidas experimentais foram pesadas aproximadamente amostras de 80 g de solo passadas em peneira com malha de 2

mm de abertura e secadas em estufa (com circulação forçada de ar) na temperatura de 45°C (TFSA: terra fina seca ao ar). Após o peneiramento, as amostras foram acondicionadas em porta amostra metálico, fornecido pelo fabricante do equipamento, para a realização das medidas (Figura 3.2.3). Para cada horizonte foram feitas triplicatas (n=3), e para cada uma das triplicatas foram realizadas dez medidas de densidade de partículas no equipamento, totalizando 30 medidas para cada horizonte.

Figura 3.2.3 - Esquema de funcionamento do picnômetro a gás. Após a pressão interna do equipamento estar zerada há a entrada do gás (A), sendo controlada pela válvula de entrada do gás (B) com a válvula seletora (C) no volume de referência (D). Para o porta amostra (E), as válvulas I e II (F) ficam abertas. A pressão é então ajustada e o valor de P₁ é anotado. Então a válvula seletora (C) é mudada para o volume do porta amostra e P₂ é anotada. Após as medidas, a válvula de saída do gás (G) é acionada e o processo é repetido para as demais medidas.



Fonte: Adaptado de Quanthachrome Instruments (2009).

Para a análise granulométrica das amostras de solo foi selecionado o método da pipeta, como descrito no Manual de Métodos de Análise de Solo da EMBRAPA. Para cada amostra, referente aos diferentes horizontes, foi realizada a dispersão, primeiramente química, de 20 g de terra fina seca ao ar (TFSA) com NaOH (hidróxido de sódio), e a posterior dispersão física das partículas por ultrassom, a fim de quebrar os agregados do solo. Após a preparação, as amostras foram submetidas a tamisação (em malha de 53 μm), onde as partículas de areia ficam retidas. Para a fração argila foi feita a sedimentação utilizando-se da lei de Stokes.

A utilização da lei de Stokes é fundamentada nas seguintes aproximações (TAVARES FILHO, 2016): 1) As partículas de silte e argila do solo precisam ser consideradas esféricas; 2) As densidades das diferentes partículas são semelhantes; 3) A queda das partículas dentro da proveta ocorre de forma que não haja interação entre elas; 4) Não pode existir gradiente de temperatura dentro da proveta, para que não haja alteração na viscosidade e densidade do líquido.

A partir da relação existente entre as forças envolvidas (após equilíbrio – velocidade terminal) na queda das partículas de solo na solução dispersante, obtemos que o tempo de queda das partículas por:

$$t = \frac{18\eta h}{g(\rho_s - \rho_l)\Phi^2} \tag{3.2.3}$$

onde, t é o tempo de queda, h é a altura de queda desde a superfície, η é a viscosidade do líquido, no caso a solução dispersante, g é a aceleração da gravidade, ρ_S é a densidade de partículas, ρ_I é a densidade do líquido e Φ é o diâmetro da partícula (TAVARES FILHO, 2016).

Após agitar a solução restante da tamisação (1 L), foi estimado o tempo de sedimentação das partículas (Equação 3.2.3) para cada amostra de solo. Após este tempo, foi pipetado um pequeno volume da suspensão (50 mL), cuja solução foi seca em estufa (45°C) para se determinar a alíquota correspondente à fração argila. Tendo a soma dos percentuais das frações argila e areia, a fração silte foi obtida pelo complemento dos percentuais para 100% (EMBRAPA, 1997; PRANDEL et al., 2014). Para cada horizonte foram realizadas triplicatas (n=3).

Fluorescência de raios X (EDXRF e WDXRF)

Para a análise elementar do solo foram utilizadas duas técnicas: a fluorescência de raios X por dispersão de energia (EDXRF) e a fluorescência de raios X por comprimento de onda (WDXRF).

As medidas de composição química por EDXRF foram efetuadas no equipamento da marca Shimadzu, modelo EDX-720. O equipamento possui um tubo de Ródio (Rh), com ajuste de voltagem de 5 a 50 kV e filamento operando com

correntes no intervalo de 1 a 1.000 µA. O detector é do tipo semicondutor de Si(Li) que possui alta resolução e trabalha resfriado por nitrogênio líquido a -196°C.

Para as medidas, as amostras de solo foram maceradas em pistilos e submetidas a peneiramento utilizando malha de 45 μ m. Após o peneiramento, as amostras foram acondicionadas em porta amostra fornecido pelo fabricante. Na base superior do porta amostra foi colocado plástico filme e na inferior um material fornecido pelo fabricante do equipamento, conhecido por *mylar* (com espessura de 6 μ m). A absorção dos raios X no *mylar* já está calibrado pelo software de aquisição de dados do equipamento de modo a não influenciar nas medidas realizadas.

O tempo gasto para obter o espectro foi de 100 s, nas bandas de energia do Sódio a Escândio (Na-Sc) (15 kV) e do Titânio a Urânio (Ti-U) (50 kV). Todas as medidas foram efetuadas no modo semiquantitativo. Foram realizadas nove medidas experimentais (n=9) para cada horizonte do solo analisado. Os resultados foram obtidos primeiramente em teores de elemento, para então ser feita a conversão para teores de óxido diretamente no software fornecido pelo fabricante do equipamento (PIRES et al., 2014).

Para a análise de WDXRF foi utilizado um equipamento da marca Rigaku, modelo ZSX Primus II. O equipamento possui um tubo de Ródio (Rh) resfriado por água. As amostras no WDXRF foram analisadas em ambiente de vácuo, e não no ar como no EDXRF. O detector é a gás, sendo utilizado o P-10, que se mantém fluindo a uma taxa constante durante as análises, sendo chamado de gás flutuante tipo PC (F-PC). O sistema também conta com um estabilizador de temperatura, para manter o cristal e o detector num único ângulo de detecção, para não haver mudança na intensidade dos raios X nem interferência na análise.

Um total de nove amostras de solo (n=9) foi analisado para cada um dos horizontes, similar às medidas efetuadas pela técnica de EDXRF. As amostras foram maceradas em pistilos e submetidas a peneiramento em malha com abertura de 45 µm. Foram medidas a massa de cerca de 0,5 g destas amostras para serem prensadas a 60 kN por 1 minuto a fim de se obter pastilhas. Não houve necessidade de adicionar nenhum aglutinante para a confecção das pastilhas para o solo estudado. Após o preparo, as amostras foram levadas para análise da composição de óxidos nas faixas de comprimento de onda característicos de Flúor a Urânio (F-U).

Programa XCOM

O programa XCOM usa como entrada de dados a composição química das amostras de interesse; com isso, o programa gera seções de choque para o efeito fotoelétrico, os espalhamentos coerente e incoerente (efeito Compton), assim como o processo de produção de pares. Com base nas seções de choque para cada um dos efeitos individuais é obtido o coeficiente de atenuação de massa total para qualquer elemento, composição e/ou mistura, na faixa de energia de 1 keV a 100 GeV. As Figuras 3.2.4 e 3.2.5 exemplificam as entradas e saídas do programa XCOM.

Para cada horizonte analisado foram obtidas nove (n=9) medidas teóricas do coeficiente de atenuação de massa. Todos os óxidos detectados pelos dois métodos utilizados foram levados em consideração para a obtenção de μ/ρ e dos demais parâmetros derivados de μ/ρ . As equações utilizadas para o cálculo dos demais parâmetros estão descritas na seção 2.5.
Figura 3.2.4 - Esquema de configuração do programa XCOM. Primeiramente, é selecionado o tipo de material (1) como elemento, composto ou mistura, para após selecionar o método de entrada das energias dos fótons de interesse (2). O próximo passo é a entrada de dados na forma da porcentagem das moléculas que fazem parte da mistura (3), para então selecionar a faixa de energia estudada (4) e inserir manualmente as energias adicionais de interesse (5). O programa fornece ainda a opção da escolha de gráficos para o coeficiente de atenuação total e para os diferentes efeitos parciais de interação da radiação (6). Após a entrada de todos os dados (configuração inicial) é necessário então submeter rodar a análise (7).

Identify material b	y
---------------------	---

- Element
- Compound
- Mixture

Method of entering additional energies: (optional)

Enter additional energies by hand

1

O Additional energies from file (Note: Your browser must be file-upload compatible)

Enter the formulae and relative weights separat	ed by a space for each compound. One compound per line. For example:
H2O 0.9 NaCl 0.1	
Note: Weights not summing to 1 will be normalize	d.
Si02 51.956 3 Al203 39.972 7 Fe203 4.037 7 K20 3.203 7 T102 0.526 7	
Optional output title:	
	Additional energies in MeV: (optional) (up to 100 allowed)
Graph options: 6	Note: Energies must be between 0.001 - 100000 MeV (1 keV - 100 GeV) (only 4 significant figures will be used). One energy per line. Blank lines will be ignored.
 Total Attenuation without Coherent Scattering Coherent Scattering Incoherent Scattering 	0.0054 5
 Photoelectric Absorption Pair Production in Nuclear Field Pair Production in Electron Field 	Energy Range:
□ None	Minimum: 0.001 MeV 4
	Maximum: 100 MeV

Submit Information Reset

Fonte: Adaptado de Nist XCOM.

Figura 3.2.5 - Exemplo de saída (gráfico) para a amostra selecionada anteriormente 8) e tabela apresentando os resultados obtidos dos coeficientes de atenuação de massa total (com e sem espalhamento coerente) e parciais 9).



Download data Reset 9								
	(required)	Scatt	tering Pair Production		oduction	Total Attenuation		
Edge	Photon Energy	Coherent	<mark></mark> Incoherent	Photoelectric Absorption	☑ In Nuclear Field	In Electron Field	♥ With Coherent Scattering	Without Coherent Scattering
	MeV	cm ² /g	cm ² /g	cm ² /g	cm ² /g	cm ² /g	cm ² /g	cm ² /g
	1.000E-03	2.058E+00	1.098E-02	3.253E+03	0.000E+00	0.000E+00	3.255E+03	3.253E+03
	1.010E-03	2.054E+00	1.116E-02	3.171E+03	0.000E+00	0.000E+00	3.173E+03	3.171E+03
	1.020E-03	2.051E+00	1.134E-02	3.090E+03	0.000E+00	0.000E+00	3.093E+03	3.090E+03
30 L ₃	1.020E-03	2.051E+00	1.134E-02	3.091E+03	0.000E+00	0.000E+00	3.093E+03	3.091E+03
	1.031E-03	2.046E+00	1.154E-02	3.001E+03	0.000E+00	0.000E+00	3.003E+03	3.001E+03
	1.043E-03	2.042E+00	1.175E-02	2.914E+03	0.000E+00	0.000E+00	2.916E+03	2.914E+03
30 L ₂	1.043E-03	2.042E+00	1.175E-02	2.914E+03	0.000E+00	0.000E+00	2.916E+03	2.914E+03
	1.069E-03	2.033E+00	1.223E-02	2.729E+03	0.000E+00	0.000E+00	2.731E+03	2.729E+03
	1.096E-03	2.023E+00	1.273E-02	2.555E+03	0.000E+00	0.000E+00	2.557E+03	2.555E+03
29 L ₁	1.096E-03	2.023E+00	1.273E-02	2.555E+03	0.000E+00	0.000E+00	2.557E+03	2.555E+03
	1.144E-03	2.006E+00	1.363E-02	2.284E+03	0.000E+00	0.000E+00	2.286E+03	2.284E+03
	1.194E-03	1.989E+00	1.459E-02	2.040E+03	0.000E+00	0.000E+00	2.042E+03	2.040E+03

Fonte: Adaptado de Nist XCOM.

Simulações de Monte Carlo

O método de Monte Carlo consiste em uma simulação experimental para obtenção dos valores de µ/p. Este método também utiliza como entrada a composição química do material estudado e pode ser realizado para compostos, misturas e moléculas. Para o perfil de solo estudado, foram utilizados os valores de composição química obtidos pelo método da WDXRF. Os valores obtidos nas técnicas GEANT4 e Fluka foram comparadas com os valores obtidos pelo XCOM.

Tomando como base o trabalho publicado por Pires e Medhat (2016) as simulações podem ser descritas da seguinte forma: 1) GEANT4: o modelo proposto foi escrito usando três classes mandatórias (duas classes de inicialização e uma classe de ação) e outras classes de ação. O modelo geométrico foi codificado na classe mandatória (*Detector Construction*). Os processos físicos foram definidos por outra classe mandatória (*Physics List*). Para raios gama, os processos de efeito fotoelétrico, efeito Compton, efeito Rayleight e produção de pares foram considerados válidos com energia abaixo de 250 eV, a fim de incluir espalhamentos múltiplos de elétrons e pósitrons e os processos de *bremsstrahlung* e ionização. Outros efeitos atômicos além do efeito fotoelétrico, tais como emissão de raios X e efeito Auger, foram também incluídos. O registro de processos interessantes foi feito pela classe *Stepping Action*. O algoritmo para gerar a eficiência computacional foi

implementado na classe *RunAction*; 2) Fluka: uma geometria simples e cilíndrica, com o eixo ao longo da direção z, foi usado no código; um feixe de fótons foi direcionado em direção ao material na direção z o qual foi atenuado em amostras cilíndricas com vários centímetros de espessura. O código foi rodado para 10 ciclos. Um cartão de pontos foi empregado para obter os valores de transmissão para cada espessura dos materiais. As transmissões dos fótons resultantes da simulação foram processadas com base nos arquivos de entrada. Plotando $ln(I_0/I)$ versus x, a inclinação da reta possibilitou a determinação do coeficiente de atenuação (Equação 2.4.1).

Difração de raios X

As amostras de solo de cada horizonte (TFSA) foram submetidas à tamisação em malha de 45 µm para então realizar a coleta de dados e posterior análise pela técnica de difração de raios X no modo de varredura contínua, na extensão de 3 a 100 graus em 20. Para isso foi utilizado um difratômetro da marca Rigaku, modelo Ultima IV, com radiação de CuK_α, voltagem de 40 kV e corrente de 30 mA (PRANDEL, 2015).

Índice de intemperização Ki e Kr

Variando de 2,0 a 2,2 (KER et al., 2012), a relação molecular da caulinita (Ki) serve como base para a distinção de solos tropicais muito intemperizados (\leq 2,2) e pouco intemperizados (>2,2 – no caso de Cambissolos) (SANTOS et al., 2018).

De acordo com o Manual de Métodos de Análises de Solos (EMBRAPA, 1997), o cálculo desse índice é realizado da seguinte maneira:

$$K_i = \left(\frac{\% SiO_2}{\% Al_2 O_3}\right) x1,70 \tag{3.2.4}$$

Para solos tropicais o índice Kr varia de ≤0,75, para solos muitos intemperizados e >0,75 para solos pouco intemperizados. Esse índice é calculado da seguinte maneira:

$$K_r = \left(\frac{(\% SiO_2/0.60)}{(\% Al_2O_3/1.02) + (\% Fe_2O_3/1.60)}\right)$$
(0.2.9)

(325)

Análises estatísticas

Foi aplicado um modelo de análise de variância em todos os dados com o objetivo de verificar a significância das medidas com probabilidade de 5% em todos os testes aplicados. A fim de padronizar as análises estatísticas os mesmos testes foram aplicados em todas as variáveis analisadas (composição de óxidos, densidade de partículas, granulometria do solo, μ/ρ , σ_M , σ_A , σ_E , Z_{eff} e N_{el}). A normalidade e homogeneidade dos parâmetros foram analisadas pelos testes de Shapiro Wilk e de Bartlett, respectivamente (AULER et al., 2017).

O teste F foi aplicado na análise de variância. Quando houve diferenças significativas pelo teste F, o teste de Tukey, que realiza a comparação múltipla de médias, foi aplicado. Para interações significativas foi aplicada uma análise de regressão linear a fim de se observar as correlações entre os parâmetros analisados. Todas as análises estatísticas foram rodadas no software R versão 3.6.3 (R Core Team, 2020).

3.3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Densidade de partículas, textura, composição de óxidos e índices de intemperismo

A Tabela 3.3.1 traz os resultados da densidade de partículas e da análise granulométrica para os diferentes horizontes do perfil de solo analisado. Apesar de haver diferenças significativas entre os conteúdos de argila, silte e areia dos horizontes, estes não apresentaram uma amplitude de classe textural muito expressiva. Verificou-se diferenças significativas na densidade de partículas entre os horizontes, com a tendência de aumento nos valores dessa propriedade com a profundidade. A densidade de partículas, minerais e orgânicas, é uma característica que depende da fração sólida do solo e, portanto, da composição química elementar. O que pode explicar as diferenças significativas da densidade de partículas dos horizontes do solo estudado, é a predominância de matéria orgânica no horizonte mais superficial (ONDRASEK et al., 2019), e nos horizontes subjacentes, predominância de minerais da rocha alterada, ou saprólito (LEPSCH, 2010).

	Areia (%)	Silte (%)	Argila (%)	Classe textural	ρs (g cm⁻³)
Horizonte					
А	38,93 a	35,03 b	26,04 ab	Franco argilosa	2,508d
AB	31,74 b	35,38 b	32,88 a	Franco argilosa	2,535c
Bi	27,03 c	52,51 a	20,46 b	Franco siltosa	2,548b
С	32,94 b	33,35 b	33,71 a	Franco argilosa	2,568a
Example a destruction de		2000)			

Tabela 3.3.1 - Valores percentuais (%) das frações areia, silte e argila, classe textural e densidade de partículas (p_S) (método do picnômetro a gás) para o perfil do Cambissolo estudado. A, AB, Bi e C representam os horizontes do solo.

Fonte: adaptado de Tech et al. (2022)

O teste de Tukey de comparação de médias foi aplicado entre os horizontes do perfil e as médias seguidas de letras iguais (minúsculas) não diferem estatisticamente entre si pelo teste (p<0,05).

Momoli et al. (2021) caracterizaram morfologicamente este e outros perfis de solo da mesma região e encontraram valores de densidade de partículas inferiores, aos encontrados neste trabalho, para o horizonte mais superficial (2,33 g cm⁻³). Os autores associaram o baixo valor ao conteúdo de matéria orgânica presente no solo e, também, a contribuição do mineral Gibbsita contido na fração argila, sendo que o valor de densidade deste mineral varia de 2,30 a 2,42 g cm⁻³. É válido ressaltar que os autores utilizaram do método do balão volumétrico, descrito no Manual de Análises de Solos da EMBRAPA (1997), para obtenção da densidade de partículas. Portanto, foi um método diferente do utilizado neste trabalho, o que pode também explicar parcialmente as diferenças observadas.

Apesar dos valores de densidade de partículas pelos distintos métodos (picnômetro a gás hélio e balão volumétrico) serem diferentes, a tendência de aumento nessa propriedade com o aumento da profundidade foi similar em ambos os estudos. Em Momoli et al. (2021), apenas no último horizonte o valor da densidade de partículas foi menor do que o valor do horizonte subjacente. O valor médio da densidade de partículas encontrada por esses autores foi de 2,41 g cm⁻³ e o valor médio encontrado no presente estudo foi igual a 2,54 g cm⁻³.

A Tabela 3.3.2 traz os resultados dos óxidos mais abundantes encontrados na composição química elementar dos horizontes do Cambissolo estudado, para os dois métodos de fluorescência de raios X empregados (WDXRF e EDXRF). Para ambos os métodos pode-se observar que o óxido de silício (SiO₂) segue a mesma tendência do conteúdo de areia nos horizontes do solo (Figura 3.3.1).

EDXRF							
Óxido (%)	SiC) ₂ A	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	K ₂ O	Ki	Kr
Horizonte							
А	52,28	Ba 39	9,66 Ab	3,91 Bb	3,13 Ba	2,24 Ba	2,10 Ba
AB	49,64 E	Bbc 4 ⁻	1,78 Aa	4,44 Ba	3,25 Ba	2,02 Bb	1,89 Bb
Bi	48,08	Bc 43	3,20 Aa	4,55 Ba	3,18 Ba	1,89 Bb	1,77 Bb
С	49,91	Bb 4 [·]	1,86 Aa	4,25 Bab	3,13 Ba	1,93 Bb	1,90 Bb
WDXRF							
Óxido (%)	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ C	03 K2O	MgO	Ki	Kr
Horizonte							
А	59,76 Aa	26,47 Bo	; 5,91 A	Ac 4,40 Ab	1,94 Aab	3,83 Aa	3,35 Aa
AB	56,74 Ab	28,70 Bb	6,65 A	Ab 4,57 Aa	2,02 Aa	3,36 Ab	2,92 Ab
Bi	55,10 Ac	30,15 Ba	n 7,07 A	Aa 4,62 Aa	1,95 Aa	3,10 Ac	2,70 Ac
С	57,10 Ab	29,01 Bb	6,47 A	Ab 4,46 Aab	0 1,85 Ab	3,35 Ab	2,93 Ab

Tabela 3.3.2 - Teores dos óxidos mais abundantes nos quatro horizontes (A, AB, Bi e C) do perfil do Cambissolo, em porcentagens, para as metodologias da EDXRF e WDXRF. Ki e Kr representam os índices de intemperismo.

Fonte: Adaptado de Tech et al. (2022)

O teste de Tukey de comparação de médias foi aplicado entre os métodos (EDXRF e WDXRF) e entre os horizontes do perfil e as médias seguidas de letras iguais (maiúsculas: métodos e minúsculas: horizontes) não diferem estatisticamente entre si pelo teste (p<0,05).

Figura 3.3.1 - Variação dos conteúdo de areia (em preto) e óxido de silício (SiO₂) (em vermelho) dos horizontes do Cambissolo estudado. As letras minúsculas acima dos pontos indicam as diferenças significativas entre os horizontes (SiO₂- em vermelho; areia- em preto).



O método da EDXRF, para o SiO₂, não apresentou diferenças significativas entre os horizontes A, AB e C, já o horizonte Bi não apresentou diferença apenas com relação ao horizonte AB. O óxido Al₂O₃, não apresentou diferenças significativas entre os horizontes AB, Bi e C, com diferenças apenas para o horizonte A. O óxido Fe₂O₃ não apresentou diferenças significativas entre os horizontes AB, Bi e C, e o horizonte A não apresentou diferença significativa em relação ao horizonte C. Já o óxido K₂O não apresentou diferença significativa entre os horizontes. No método da WDXRF, o óxido SiO₂ não apresentou diferenças significativas entre os horizontes AB e C. O mesmo pode ser observado para os óxidos Al₂O₃ e Fe₂O₃. O óxido K₂O não apresentou diferenças significativas entre os horizontes AB, Bi e C, e o horizonte A não apresentou diferença significativa em relação ao horizonte C. O óxido MgO foi detectado apenas no método da WDXRF, não apresentando diferenças significativas entre os horizontes A, AB e Bi, e o horizonte C não mostrou diferença significativa em relação ao horizonte A. Os valores do óxido Fe₂O₃ encontrados por ambos os métodos estão dentro da faixa de valores encontrados por Motta et al. (2002) para Cambissolos do grupo Araxá, na região do Planalto Central Brasileiro.

Apesar das diferenças significativas no conteúdo dos óxidos entre os métodos, observou-se que as variações desses óxidos ao longo do perfil do solo seguem a mesma tendência para ambos os métodos (Figura 3.3.2).

Figura 3.3.2 - Tendência de variação dos principais óxidos detectados pelas metodologias do EDXRF (em vermelho) e WDXRF (em preto). As letras minúsculas acima dos pontos são diferenças significativas entre os horizontes, e as maiúsculas diferenças significativas entre os métodos (WDXRF- em preto; EDXRF- em vermelho). a) b)



Fonte: Adaptado de Tech et al. (2022).

Os valores de Ki e Kr são utilizados como uma forma de medir o grau de intemperismo de solos (MARQUES et al., 2007) tropicais e subtropicais, pois sugerem uma estimativa da relação entre os minerais caulinita e gibbsita presentes nesses solos (Tabela 3.3.2). Portanto, para um solo ser considerado pouco intemperizado, os valores de Ki devem ser >2,2, assim sendo, os maiores valores deste parâmetro indicam um intemperismo incipiente dos horizontes do solo, mais acentuado no horizonte A (ambos os métodos – EDXRF e WDXRF), como já esperado. Para o método da EDXRF podemos observar que o índice de intemperismo se mostrou diferente apenas no horizonte A, não mostrando diferença significativa para os demais horizontes. Já para o método da WDXRF, o horizonte Bi apresentou o menor valor de Ki, mostrando um grau de intemperismo mais acentuado em relação aos demais horizontes (SANTOS et al., 2010).

É possível observar ainda que entre os métodos (EDXRF e WDXRF), a WDXRF mostrou resultados de Ki e Kr mais consistentes com as características morfológicas observadas, ou seja, valores de índice de intemperismo que correspondem a um solo menos desenvolvido, como é o caso do Cambissolo. Tanto para a técnica de EDXRF quanto para WDXRF, o índice Kr apresentou diferenças para o horizonte A, o que está em concordância como o fato deste horizonte estar mais exposto às ações do intemperismo. Não foram observadas diferenças significativas para os horizontes AB e Bi. No entanto, o índice Kr mostra resultados com diferenças significativas quando determinado com dados do WDXRF para o horizonte C, evidenciando que a porção mais profunda do solo guarda características mais próximas às rochas do material de origem, como deveria ser esperado (MOREIRA; OLIVEIRA, 2008; ROCHA et al., 2002).

As Figuras 3.3.3 e 3.3.4 trazem as correlações dos índices Ki e Kr para os dois métodos estudados, e a Tabela 3.3.3 os valores da equação de reta e os valores da correlação de Pearson das correlações.

Figura 3.3.3 - Correlação entre os índices Ki e Kr em relação aos óxidos utilizados no cálculo desses índices (equações 3.2.7.1 e 3.2.7.2) para o método da EDXRF.

EDXRF



Fonte: A autora.

Para o método da EDXRF podemos observar que ambos os índices, Ki e Kr, apresentaram correlação positiva com o óxido SiO₂. De acordo com as Equações 3.2.4 e 3.2.5, os índices Ki e Kr apresentam relação direta com o conteúdo de SiO₂, explicando as correlações encontradas. No entanto, estes índices não apresentaram correlações com os demais óxidos necessários para o seu cálculo, para este método de análise da composição de óxidos do solo.



Fonte: A autora.

Para o método da WDXRF é possível observar que ambos os índices, Ki e Kr, obtiveram correlação negativa com o óxido Al₂O₃. De acordo com as Equações 3.2.4 e 3.2.5, o índice Ki está inversamente relacionado ao conteúdo de Al₂O₃, o que explica o comportamento da correlação obtida, ou seja, quanto maior o conteúdo deste óxido, menor o valor do índice. O mesmo acontece para o índice Kr, que é inversamente proporcional ao conteúdo do óxido Al₂O₃. Este índice também é

WDXRF

inversamente proporcional ao conteúdo do óxido Fe₂O₃, entretanto não foi observada uma correlação forte dos índices de intemperismo com o conteúdo deste óxido.

Tabela 3.3.3 - Valores dos coeficientes correlação (R) e de determinação (R²) e demais parâmetros para as relações lineares (y=a*x+b) apresentadas nas Figuras 3.3.1.3 e 3.3.1.4. Os parâmetros a e b indicam os coeficientes angular e linear, respectivamente.

Parâmetros do ajuste	а	b	R	R ²
EDXRF				
Ki x SiO ₂	8,603	32,569	0,876	0,768
Ki x Al ₂ O ₃	-4,813	38,234	-0,664	0,441
Kr x SiO ₂	12,129	26,660	0,994	0,988
Kr x Al ₂ O ₃	-6,236	40,573	-0,692	0,479
Kr x Fe ₂ O ₃	-0,678	5,589	-0,307	0,094
WDXRF				
Ki x SiO ₂	4,690	33,958	0,691	0,478
Ki x Al ₂ O ₃	-4,983	45,601	-0,995	0,991
Kr x SiO ₂	5,192	34,494	0,685	0,469
Kr x Al ₂ O ₃	-5,551	45,138	-0,992	0,985
Kr x Fe ₂ O ₃	-0,952	7,125	-0,694	0,482

Fonte: A autora.

Parâmetros de interação da radiação

A energia dos fótons de 59,5 keV, que corresponde a fonte radioativa de ²⁴¹Am, geralmente empregada em pesquisas de análises propriedades físicas do solo pela técnica de atenuação de raios gama, foi utilizada para comparar os valores dos parâmetros de interação da radiação calculados pelos dois métodos de obtenção da composição química do solo (PIRES, 2018). Esta energia de fóton, compreendida na faixa de baixas energias (1 keV – 90 keV), diz respeito a região na qual os parâmetros de interação da radiação são mais sensíveis a pequenas mudanças na composição química do solo.

O coeficiente de atenuação de massa possui acentuado decréscimo em seus valores com o aumento da energia para a região de baixas energias (1 keV ~ 90 keV) dos fótons (Figura 3.3.5 a-b). Nessa região, o efeito fotoelétrico é o processo de interação dominante, especialmente para materiais com alto número atômico, pois a seção de choque para este efeito é proporcional a Z⁴⁻⁵. É nesta região que os parâmetros de interação apresentam os valores mais altos. À medida que a energia dos fótons aumenta, a influência do efeito fotoelétrico diminui, de modo que o efeito Compton passar a dominar na região de energias intermediárias até

Continua na próxima página



Figura 3.3.5 - Variação do coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ) e seções de choque molecular, atômica e eletrônica (σ_M , σ_A and σ_E) em função do intervalo de energia para o Cambissolo estudado pelas metodologias do EDXRF e WDXRF. A, AB, Bi e C representam os horizontes do solo.



Os valores de μ/ρ obtidos por meio do programa XCOM, para os dois métodos (EDXRF e WDXRF), constam na Tabela 3.3.4 O método da regra da mistura no qual o programa XCOM é baseado para a obtenção dos valores de μ/ρ trata-se de uma técnica já bem estabelecida, sendo utilizada no estudo da interação da radiação de diversos materiais (MEDHAT, 2015).

O coeficiente de atenuação está relacionado com a probabilidade de interação dos fótons com o solo (KNOLL, 2010). Os fótons interagem primeiramente, com os elétrons dos átomos que constituem o solo analisado, por isto, μ/ρ depende do número atômico e da densidade do meio poroso. A energia dos fótons também possui grande influência nos valores de μ/ρ como pode ser observado nos resultados apresentados na Figura 3.3.5.

É possível observar através dos resultados da composição química elementar (Tabela 3.3.2), que entre os principais elementos que compõe os óxidos, o Fe é o que se destaca com maior número atômico (Z=26). Os resultados de μ/ρ não tiveram diferenças significativas entre os horizontes, para o método da EDXRF, pois a diferença significativa entre o conteúdo de Fe₂O₃ dos horizontes se dá apenas do horizonte AB e Bi com o horizonte A. O horizonte C é estatisticamente semelhante ao A, AB e Bi.

Tabela 3.3.4 - Valores dos parâmetros de interação da radiação (coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ), seções de choque molecular (σ_M), atômica (σ_A), eletrônica (σ_E), número atômico efetivo (Z_{eff})) para as metodologias da EDXRF e WDXRF, para fótons de energia de 59,5 keV, correspondentes à fonte de ²⁴¹Am. A, AB, Bi e C representam os horizontes do solo.

EDXRF				
Horizontes	А	AB	Bi	С
Parâmetros				
μ/ρ	0,290	0,298	0,300	0,294
(cm ² g ⁻¹)	Ba	Ва	Ba	Ba
σ _M	5,17x10 ⁶	5,08x10 ⁶	3,67x10 ⁶	5,58x10 ⁶
(barn/molécula)	Aa	Aa	Aa	Aa
σΑ	10,1	10,3	10,4	10,2
(barn/átomo)	Bb	Bab	Ва	Bab
σε	0,99	1,02	1,03	1,01
(barn/elétron)	Bb	Bab	Ва	Bab
Zeff	10,2	10,1	10,1	10,1
	Ва	Ва	Ва	Ва
Nel	2,93	2,92	2,92	2,93
(x10 ²³ elétrons g ⁻¹)	Aa	Aa	Aa	Aa
WDXRF				
Horizonte	А	AB	Bi	С
Parâmetro				
μ/ρ	0,306	0,311	0,301	0,309
(cm ² g ⁻¹)	Ac	Ab	Aa	Ab
σм	6,82x10 ⁵	1,59x10 ⁶	6,79x10 ⁵	9,82x10 ⁵
(barn/molécula)	Aa	Aa	Aa	Aa
σΑ	10,7	10,9	11,0	10,8
(barn/átomo)	Ac	Aab	Aa	Ab
σε	1,04	1,06	1,07	1,06
(barn/elétron)	Ac	Aab	Aa	Ab
Zeff	10,3	10,3	10,3	10,3
	Aa	Aa	Aa	Aa
Nel	2,94	2,93	2,93	2,93
(x10 ²³ elétrons g ⁻¹)	Aa	Ab	Aab	Aab

Fonte: Adaptado de Tech et al. (2022).

O teste de Tukey de comparação de médias foi aplicado entre os métodos (WDXRF e EDXRF) e entre os horizontes do perfil e as médias seguidas de letras iguais (maiúsculas: métodos e minúsculas: horizontes) não diferem estatisticamente entre si pelo teste (p<0.05).

Já para o método da WDXRF, os horizontes apresentaram diferenças significativas de μ/ρ seguindo a mesma tendência do conteúdo de Fe₂O₃ para os diferentes horizontes (Tabela 3.3.2). Os valores de μ/ρ entre os métodos empregados também tiveram diferenças significativas. Isso se deve a diferença significativa do conteúdo de Fe₂O₃ entre os métodos, onde o resultado foi maior para

o método da WDXRF, explicando os maiores valores de μ/ρ para este método (Figura 3.3.6a, Tabela 3.3.5). Podemos observar ainda (Figura 3.3.6b, Tabela 3.3.5) que μ/ρ apresentou correlação negativa com o óxido de SiO₂. Este óxido é importante de ser analisado devido a sua abundância no solo estudado.





Fonte: Adaptado de Tech et al. (2022).

Tabela 3.3.5 - Valores da correlação de Pearson (R) e demais parâmetros para as relações lineares (y=a*x+b) apresentadas na Figura 3.3.2.2. Os parâmetros a e b indicam os coeficientes angular e linear, respectivamente. Os dados referem aos parâmetros obtidos utilizando o método de WDXRF.

Parâmetros do ajuste	а	b	R	R²
μ/ρ x SiO ₂	-0,002	0,402	0,926	0,857
μ/ρ x Fe ₂ O ₃	0,007	0,265	0,958	0,918
σ _A x Fe ₂ O ₃	0,285	9,021	0,938	0,881
σ _E x Fe ₂ O ₃	0,027	0,875	0,937	0,878

Fonte: Adaptado de Tech et al. (2022).

A sensibilidade de μ/ρ com o conteúdo de Fe₂O₃ ou com a mudança na composição química elementar do solo, já é um resultado extensamente descrito na literatura científica. Pires et al. (2014) mostraram que ciclos de umedecimento e secamento podem afetar a composição química do solo de modo a influenciar no seu coeficiente de atenuação de massa. Ferreira et al. (2018) analisaram a

dependência dos parâmetros de interação da radiação em solo no qual calcário foi aplicado, mostrando que µ/p sofre a influência de mudanças na composição do solo devido ao uso de corretivos. Pires et al. (2015) investigaram a influência da composição mineralógica do solo nos valores de µ/p, concluindo que o mineral goethita exerce importante influência, devido à presença do óxido Fe₂O₃ existente em sua composição. Resultado semelhante foi observado por Pires et al. (2019) ao mostrarem ser possível quantificar a composição elementar de solos tropicais, a partir dos minerais encontrados em sua composição, e como esta metodologia pode influenciar nos parâmetros de interação da radiação. Prandel et al. (2021) mostraram recentemente a importância da fração argila e do mineral goethita nos valores de µ/p de solos tropicais. Estes autores mostraram, por meio de técnicas estatísticas, como as diferentes propriedades relacionadas com a composição do solo afetam os parâmetros de interação da radiação. Camargo et al. (2021), em trabalho recente, investigaram teoricamente a influência da composição química de cinco diferentes tipos de solos na obtenção de µ/p. Os autores mostraram, por meio de análise detalhada, que µ/p é extremamente sensível a composição química do solo, principalmente com relação aos óxidos majoritários que compõem os solos de regiões tropicais e subtropicais. Na análise foi mostrado como cada óxido individual pode atuar na atenuação da radiação.

A seção de choque molecular (σ_M) é definida pelo coeficiente de atenuação de massa total do solo com a soma da fração peso das moléculas que o constituem (Equação 2.5.1). Por depender do coeficiente de atenuação de massa, a variação de σ_M com a energia dos fótons possui comportamento similar a μ/ρ , de acordo com os efeitos que constituem a interação total da radiação (efeito fotoelétrico, efeito Compton e produção de pares) (Figura 3.3.5c,d).

O resultado da influência de μ/ρ em σ_M é linear (Figura 3.3.7a,b), ou seja, aumentos em μ/ρ provocam aumentos em σ_M . Os testes estatísticos aplicados de normalidade e homogeneidade (Shapiro Wilk e Bartlett) não foram efetivos e conclusivos para indicar diferenças significativas para este parâmetro entre os horizontes do solo, devido a amplitude de seus valores e do desvio padrão. O parâmetro em questão é muito sensível às mudanças na composição química elementar, mesmo em quantidades pequenas. Entretanto, para o método da EDXRF (Tabelas 3.3.2 e 3.3.4, Figura 3.3.7a), apesar do horizonte Bi não possuir diferença significativa para o óxido de Fe₂O₃ entre os horizontes AB e C, esse é o horizonte que possui menor valor de $\sigma_{\rm M}$ (3,67x10⁶ barn/molécula), ao passo que os demais horizontes apresentam valores mais próximos entre si (5,17x10⁶; 5,05x10⁶; 5,58x10⁶ barn/molécula).

Já para o método da WDXRF, os horizontes Bi e A possuem valores menores de σ_M e mais próximos entre si. O horizonte Bi possui maior conteúdo de Fe₂O₃, já o horizonte A possui maior conteúdo de SiO₂ (Tabelas 3.3.2 e 3.3.4, Figura 3.3.7b). Os horizontes AB e C possuem os teores semelhantes dos óxidos (SiO₂ e Fe₂O₃), sem diferenças significativas, apesar de apresentarem valores com maiores variações de σ_M . Portanto, não foi possível estabelecer uma conexão ou correlação dos valores obtidos para o parâmetro σ_M com as variações nos conteúdos dos óxidos mais abundantes presentes no Cambissolo. Entretanto, no geral, o método da WDXRF também apresenta os valores mais baixos para esse parâmetro em comparação com os valores gerados a partir do método da EDXRF.

Figura 3.3.7 - Relação entre as seções de choque molecular, atômica e eletrônica (σ_M , $\sigma_A e \sigma_E$) em função do coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ), para as metodologias da EDXRF e WDXRF. A, AB, Bi e C representam os horizontes do solo.



Fonte: Adaptado de Tech et al. (2022).

Quando se observa a dependência de σ_M com μ/ρ , os menores valores da seção de choque molecular para os horizontes (A e C) com maior conteúdo de Fe₂O₃ (Figura 3.3.7a-b) possuem um coeficiente angular de reta maior (EDXRF: a_A=1,78, a_C=1,89; WDXRF: a_A=5,12, a_C=3,17), assim como os horizontes (AB e Bi) que apresentam menor conteúdo do óxido em questão (Fe₂O₃) apresentam um

coeficiente angular de reta menor com μ/ρ , para o método da EDXRF (EDXRF: a_{AB}=1,69, a_{Bi}=1,21; WDXRF: a_A=2,22, a_{Bi}=2,16). Para o método da WDXRF, podemos observar que as horizontes A e Bi ficaram com valores de coeficiente angular de reta baixos e bem semelhantes e os horizontes C e AB com valores mais altos do coeficiente angular quando comparado com o método da WDXRF. Os valores de μ/ρ decaem com o aumento da energia, então, os horizontes que possuem menor σ_M apresentam um coeficiente angular de reta maior com o aumento da energia, enquanto os horizontes que possuem maior σ_M apresentam um coeficiente angular de reta menor com o aumento da energia.

A seção de choque atômica (σ_A) é a seção de choque molecular dividida pela fração de átomo das moléculas que constituem o solo (Equação 2.5.2) (MUDAHAR; SAHOTA, 1988). Por depender indiretamente de μ/ρ , a inclinação da reta em função da energia para este parâmetro possui comportamento semelhante a μ/ρ e a σ_M (Figura 3.3.5e-f). Tanto para o método da EDXRF quanto para a WDXRF, os valores não possuem distinção entre si a partir de suas curvas com a variação da energia dos fótons.

Entretanto, para o método da WDXRF é possível observar (Tabelas 3.3.2 e 3.3.4, Figura 3.3.6c) que os valores de σ_A são influenciados pelo conteúdo de Fe₂O₃ presente nos horizontes, o que corrobora com os resultados encontrados em Medhat e Pires (2016). Estes autores propuseram o uso de σ_A para classificar os solos de acordo com suas classes texturais, mostrando através de composições texturais simuladas, que solos mais argilosos possuem maior valor desse parâmetro. Já para o método da EDXRF, não é possível observar uma relação linear com o conteúdo de Fe₂O₃, pois há diferença somente entre o horizonte AB e Bi (estatisticamente semelhantes) com o A, pois o horizonte C se mostra estatisticamente semelhante aos demais horizontes (A, AB e Bi). As curvas de σ_A em função de μ/ρ , assim como em função da energia, não apresentam distinções entre si. Entretanto, fica clara a existência de uma dependência linear entre os parâmetros (Figura 3.3.7c-d).

A seção de choque eletrônica (σ_E) depende da soma da fração atômica, da massa, do número atômico e do coeficiente de atenuação de massa de cada elemento que constitui a composição química do solo (Equação 2.5.3). Por este motivo, a variação de σ_E com a energia dos fótons apresenta comportamento similar ao observado para µ/p e as outras seções de choque (σ_M e σ_A) (PIRES, 2018), não

apresentando diferenças entre as curvas (Figura 3.3.5g-h). A dependência de σ_E com µ/p também é linear e sem distinção entre as retas (Figura 3.3.7e-f). É possível observar que os valores de σ_E para o método da WDXRF, é influenciado pelo conteúdo de Fe₂O₃ presente nos horizontes do solo (Tabela 3.3.2, Figura 3.3.7d), visto que σ_E segue a mesma tendência com relação à variação do óxido de Fe₂O₃ (MEDHAT; PIRES, 2016). Como no caso de σ_A , para a metodologia da EDXRF não é possível observar a mesma influência do óxido Fe₂O₃ em σ_E devido às diferenças encontradas entre os horizontes para este óxido.

O número atômico efetivo (Z_{eff}) é obtido pela divisão dos parâmetros $\sigma_A e \sigma_E$ (Equação 2.5.4) (MEDHAT et al., 2014). Apesar dos valores para este parâmetro não apresentarem diferenças significativas entre os horizontes (Tabela 3.3.4), para o valor de energia selecionado (59,5 keV), as curvas de Z_{eff} com a energia dos fótons apresentam melhor distinção entre si quando comparadas as curvas dos demais parâmetros. É possível observar também que as curvas de Z_{eff} obtidas pelo método da WDXRF são mais suaves do que as curvas obtidas pelo método da EDXRF (Figura 3.3.8a-b). Apesar dos valores de Z_{eff} não apresentarem diferenças significativas entre os horizontes, foi observada diferença significativa entre os métodos, onde os maiores valores foram apresentados pelo método da WDXRF.

O parâmetro Z_{eff} mostra bastante sensibilidade com a mudança na composição química elementar do material estudado (KUCUK et al., 2013; HANAGODIMATH; MANOHARA, 2007). O objetivo deste parâmetro é que todos os átomos que constituem as moléculas do solo possam ser substituídos por um único possuindo um número atômico médio. O Cambissolo estudado possui elementos que variam de Z=8 (O) a Z=40 (Zr) (tabela em Anexo), e como esperado, os valores deste parâmetro ficam dentro deste intervalo. Entretanto, o parâmetro possui dependência inversamente proporcional à soma da abundância fracional (fi) de cada molécula constituinte. Os elementos mais leves como o O (8), Al (13) e Si (14) são os que possuem maior valor de abundância fracional, portanto os valores de Z_{eff} ficam mais próximos deste limite inferior de valores (FERREIRA et al., 2018).

Figura 3.3.8 - Variação do número atômico efetivo e densidade eletrônica (Z_{eff} e N_{el}) em função do intervalo de energia estudado e análise da relação entre Z_{eff} e N_{el} para as metodologias de EDXRF e WDXRF. A, AB, Bi e C representam os horizontes do solo.



Fonte: Adaptado de Tech et al. (2022).

A densidade eletrônica (N_{el}) é obtida a partir da divisão de μ/ρ e σ_E (Equação 2.5.5) (KUCUK et al., 2013). Apesar de depender diretamente de μ/ρ , N_{el} possui comportamento semelhante à Z_{eff} com a variação da energia dos fótons (Figura 3.3.8c,d), apresentando melhor distinção entre curvas com a energia. Porém, os valores do parâmetro N_{el} não apresentam diferenças significativas entre os horizontes e os métodos estudados. É possível observar, assim como para Z_{eff}, que

as curvas de Nel geradas a partir do método da WDXRF são mais suaves do que as curvas obtidas pelo método da EDXRF (Figura 3.3.8c-d).

Ao observarmos a dependência linear de N_{el} com Z_{eff} (Figura 3.3.8e-f) podemos inferir que a densidade eletrônica segue a ordem de diminuição do Fe₂O₃, apresenta dependência inversamente proporcional, ou seja, quanto maior o conteúdo de Fe₂O₃, menor o valor de N_{el}. Este comportamento pode ser observado em ambos os métodos. Estes resultados estão em concordância com Camargo et al (2022) que encontrou uma correlação negativa (r=-0,957) entre o conteúdo de Fe₂O₃ e o parâmetro N_{el}, para solos com composições de óxidos distintas.

O Z_{eff} e a N_{el} corroboram a primeira hipótese proposta no trabalho. Podemos observar a partir dos resultados estatísticos que Z_{eff} não apresenta diferenças significativas entre os horizontes do Cambissolo, entretanto, possui uma melhor distinção entre os horizontes quando analisado em função da energia. O mesmo se observa para N_{el} que não teve diferença significativa entre os horizontes para o método da EDXRF e ainda assim apresenta uma melhor separação entre os horizontes quando analisadas em função da energia.

Métodos baseados na simulação de Monte Carlo

Em adição aos resultados apresentados anteriormente, foram realizadas medidas teóricas de µ/p utilizando o método de simulação de Monte Carlo. Os códigos computacionais utilizados foram o GEANT4 e o Fluka. Para aferição da qualidade dos valores de µ/p simulados, foi utilizado os valores do programa XCOM como referência. A composição química utilizada como entrada dos dados foi obtida pelo método da WDXRF. A Figura 3.3.9 traz as curvas dos valores de µ/p em função do intervalo de energia selecionado para o estudo. É possível observar a partir da Tabela 3.3.6 que o GEANT4 apresentou diferença significativa no horizonte C. Nos valores obtidos pelo XCOM, o horizonte C não apresenta diferenças significativas em relação ao horizonte AB. Já nos resultados da simulação GEANT4, o horizonte C é estatisticamente semelhante ao horizonte A.

Figura 3.3.9 - Variação do coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ) para os dois métodos de simulação de Monte Carlo (GEANT4 e Fluka) em função da energia dos fótons para o Cambissolo estudado. A, AB, Bi e C representam os horizontes do solo.



Fonte: A autora.

Tabela 3.3.6 - Valores de μ/ρ obtidos por meio da simulação computacional de Monte Carlo (GEANT4 e Fluka). Os valores obtidos através do programa XCOM são considerados referência. A, AB, Bi e C representam os horizontes do solo.

Horizonte	А	AB	Bi	С
		μ/ρ (cm² g⁻¹)		
XCOM	3,06x10 ⁻¹	3,13 x10 ⁻¹	3,15 x10 ⁻¹	3,06 x10 ⁻¹
	ABc	Ab	Aa	Ab
GEANT4	3,06 x10 ⁻¹	3,13 x10 ⁻¹	3,15 x10 ⁻¹	3,06 x10 ⁻¹
	Ac	Ab	Aa	Ac
FLUKA	3,03 x10 ⁻¹	3,10 x10 ⁻¹	3,12 x10 ⁻¹	3,03 x10 ⁻¹
	BCb	Ba	Ba	Bb

Fonte: A autora.

O teste de Tukey de comparação de médias foi aplicado entre os métodos (WDXRF e EDXRF) e entre os horizontes do perfil e as médias seguidas de letras iguais (maiúsculas: métodos e minúsculas: horizontes) não diferem estatisticamente entre si pelo teste (p<0.05).

Na simulação por Fluka, os horizontes A e AB apresentam resultados significativamente diferentes quando comparados com os resultados obtidos pelo XCOM. Na simulação Fluka, o horizonte A é estatisticamente semelhante ao horizonte C e o horizonte AB semelhante ao horizonte Bi. Nos valores do XCOM, o

horizonte A apresenta os menores valores para μ/ρ e o horizonte AB é semelhante ao horizonte C. A simulação Fluka foi a que apresentou menores diferenças estatística entre os horizontes, enquanto a simulação GEANT4 e o programa XCOM apresentaram resultados diferentes entre os horizontes em relação ao Fluka; possibilitando uma melhor distinção das variações de μ/ρ , sendo mais fácil correlacionar estes resultados com aqueles obtidos com relação a composição química dos horizontes (Figura 3.3.10).

Figura 3.3.10 - Variação do coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ) para os quatro horizontes (A, AB, Bi e C) do perfil do Cambissolo estudado para os diferentes métodos de simulação (XCOM- em preto, GEANT4- em vermelho, Fluka- em azul). As letras maiúsculas indicam as diferenças significativas entre os métodos (XCOM- em preto; GEANT4- em vermelho; Fluka- em azul).



Fonte: A autora.

É possível observar a partir da Tabela 3.3.6, que o programa XCOM apresenta concordância nos valores de μ/ρ comparados com o GEANT4 e mostra semelhança com o Fluka apenas para horizonte superficial. Esses resultados estão em concordância com Singh e Medhat (2016), que estudaram os valores de μ/ρ de alguns compostos (materiais de construção, vidros, plásticos, etc.) obtidos pelo método experimental, XCOM e GEANT4. Esses autores observaram que os valores de μ/ρ obtidos pelo GEANT4 se mostraram mais próximos dos valores do XCOM, do que em relação aos valores obtidos experimentalmente. Entretanto, os valores obtidos pelos três métodos apresentaram concordância.

Abouhaswa et al. (2021) estudaram experimentalmente e por meio do XCOM e Fluka as propriedades de atenuação de vidros compostos por TiO₂-Na₂O-Bi₂O₃-B₂O₃. Os resultados demonstram uma maior concordância dos valores obtidos experimentalmente em relação aos obtidos pelo XCOM, do que quando comparados com o código Fluka. Os autores afirmam que apesar das diferenças entre métodos, os valores apresentaram concordância entre si e que as diferenças observadas se devem ao arranjo "experimental" simulado e a base de dados utilizada na simulação. Tekin (2016) comparou os valores de μ/ρ de amostras de concreto e observou boas correlações entre os métodos comparados (XCOM e Fluka). Entretanto, os valores obtidos pela simulação de Monte Carlo, foram mais baixos quando comparados ao XCOM. O autor conclui que as diferenças encontradas se devem ao arranjo "experimental" simulado e nas bases de dados da simulação, semelhante ao observado no trabalho de Abouhaswa et al. (2021). Singh et al. (2015) investigaram os valores de interação da radiação para algumas ligas de aço usando o código GEANT4, XCOM e medidas experimentais. Os valores de μ/ρ foram usados para calcular Z_{eff}. Os valores encontrados em todos os métodos fornecem resultados representativos de μ/ρ .

Difração de raios X

A litologia da área é representada por gnaisses e migmatitos do Complexo Goiano e micaxistos e quartzitos do Grupo Araxá. O nome do grupo foi dado por Barbosa (1970) durante os estudos realizados no Triângulo Mineiro, nos arredores do Araxá. Tais xistos, embora dobrados conjuntamente às rochas granitos gnáissicas do Complexo Goiano, apresentam evidências de estarem sobrepostas às mesmas (SIMÕES, 1984).

A Figura 3.3.11 traz os difratogramas obtidos pela técnica de difração de raios X para cada horizonte do Cambissolo estudado. Essa análise traz um quadro geral de minerais que compõe o solo estudado, uma vez que há evidências de picos dos minerais quartzo (Qz), gibbsita (Gbs) e muscovita (Ms).

Figura 3.3.11 - Difratogramas dos horizontes (A, AB, Bi e C) do Cambissolo estudado. Neles estão indicados os minerais encontrados nos horizontes do Cambissolo (Gbs-gibbsita; Ms- muscovita; Qzquartzo).

b) Horizonte AB

a) Horizonte A



Fonte: A autora.

O quartzo é um mineral primário e está presente entre 50 e 95% da fração areia dos solos e está relacionado ao material de origem dos solos. A gibbsita é um mineral secundário presente, geralmente, na fração argila do solo. Esse mineral é formado a partir da liberação do Al durante os processos de intemperização do solo (RESENDE, 2011).

A muscovita é um tipo de mica, que assim como o quartzo é um mineral característico do material de origem, que no caso do Cambissolo estudado é a Muscovita-Xisto. O processo de intemperismo desse mineral geralmente produz minerais de argila, liberando potássio preso na sua estrutura cristalina. Por este motivo são fontes importantes de potássio às plantas (MELO et al., 2000).

Nos micaxistos do Grupo Araxá predominam minerais micáceos, feldspatos e ainda quartzo, sendo assim, os solos formados herdarão os íons da decomposição desses minerais, predominando o grupo de alumino-silicatos.

3.4 CONCLUSÕES

A partir da composição elementar dos horizontes do solo foi possível obter uma análise detalhada, e mais minuciosa, de seus parâmetros de interação da radiação. Para este solo, foi possível observar que os parâmetros μ/ρ , σ_A e σ_E tiveram seus valores influenciados pelo Fe₂O₃, mostrando como a composição química elementar pode influenciar os resultados dos parâmetros de interação da radiação.

O parâmetro σ_M não correlacionou com nenhum óxido específico deste solo, entretanto as análises deste parâmetro em função de μ/ρ trouxeram resultados interessantes acerca da composição química elementar do solo. Apesar do parâmetro Z_{eff} não apresentar diferenças significativas entre os horizontes, ele apresentou diferenças significativas com o método (EDXRF e WDXRF) empregado na análise da composição química elementar, mostrando ser um parâmetro sensível a mudanças na composição dos óxidos mais abundantes do solo.

Com base na composição de óxidos deste solo e da análise com os parâmetros de interação da radiação, foi possível concluir que os dois métodos empregados para obtenção da composição de óxidos foram efetivos. Entretanto, o método da WDXRF se mostrou mais sensível na detecção dos teores de Fe₂O₃ e MgO.

Já o parâmetro N_{el} não apresentou correlações, nem diferenças significativas na faixa de energia selecionada para comparações entre os métodos, entretanto apresentou diferenças significativas entre os horizontes, para o método da WDXRF. Entretanto, as curvas deste parâmetro, assim como Z_{eff}, apresentaram distinções mais visíveis entre os horizontes estudados, mostrando ser um parâmetro com melhores distinções quando se trata de diferenças na composição química. Este resultado mostra que estes parâmetros (Z_{eff} e N_{el}) são sensíveis, mesmo quando não há diferença significativa na composição de óxidos do solo.

Os métodos de simulação computacional analisados (XCOM, GEANT4 e Fluka) mostraram valores de µ/p concordantes entre si. O método GEANT4 mostrou

resultados estatisticamente semelhantes ao XCOM, entretanto sem grandes diferenças entre os horizontes. O método Fluka mostrou valores estatisticamente diferentes do método XCOM, mostrando falta de concordância em relação ao método considerado referência neste trabalho.

Os difratogramas analisados mostraram um quadro geral de minerais que o solo pode apresentar na terra fina seca ao ar, confirmando as análises morfológicas a respeito do material de origem do solo. As análises físicas (p_s, k_i, k_r e granulometria do solo) realizadas neste solo não apresentarem correlação com a composição química ou com os parâmetros de interação da radiação. Entretanto, os resultados das análises físicas serviram de base para as discussões acerca da formação e classificação do solo.

Estes resultados levantaram novas discussões acerca dos valores obtidos dos parâmetros de interação da radiação e os óxidos majoritários dos solos. Estes parâmetros analisados são sensíveis a mudanças significativas na composição química do solo, mesmo se tratando de um solo relativamente jovem e sem muita distinção entre seus horizontes. Além de que este Cambissolo é oriundo de uma unidade de conservação. Estes resultados de composição química e análise dos parâmetros em função dela, podem vir a servir de referência para trabalhos posteriores com solos de mesma classificação e da região ao redor do PESD, que foram submetidos a ações antrópicas.

REFERÊNCIAS

ABOUHASWA, A. S. et al. Synthesis, physical, optical, mechanical, and radiation attenuation properties of TiO₂-Na₂O-Bi₂O₃-B₂O₃ glasses. **Ceramics International**, v. 47, p. 185-204, 2021.

AULER, A. C. et al. Effects of surface-applied and soil-incorporated lime on some physical attributes of a Dystrudept soil. **Soil Use and Management**, v. 33, p. 129-140, 2017.

APPOLONI C. R.; RIOS, A. Mass Attenuation Coefficients of Brazilian Soils in the Range 10-1450 keV. Applied Radiation and Isotopes, v. 45, p. 287-291, 1994.

BACCHI, O. O. S. et al. Gamma-ray beam attenuation as an auxiliary technique for the evaluation of soil water retention curve. **Science Agriculture**, v. 55, p. 499-502, 1998.

BARBOSA, M. A. O Ecoturismo e a Sustentabilidade-Parque Estadual da Serra **Dourada – GO (PESD)**. Dissertação. Universidade Católica de Goiás, Goiânia, 2008.

CAMARGO, M. A.; KODUM, K. S.; PIRES, L. F. How Does the Soil Chemical Composition Affect Its Cross-sections, Effective Atomic Number and Electron Density? Computer Simulation Analysis to Highlight the Radiation-soil Interaction Processes. **Brazilian Journal of Physics**, v. 52, p. 154, 2022.

CAMARGO, M. A.; KODUM K. S.; PIRES, L. F. How Does the Soil Chemical Composition Affect the Mass Attenuation Coefficient? A Study Using Computer Simulation to Understand the Radiation-Soil Interaction Processes. **Brazilian Journal of Physics**, p.1-9, 2021.

COSTA, J. C. et al. Soil mass attenuation coefficient: Analysis and evaluation. **Annals of Nuclear Energy,** v. 64, p. 206-211, 2014.

CRESTANA, S.; CESAREO, R.; MASCARENHAS, S. Using a computed tomography miniscanner in soil Science. **Soil Science**, v. 142, p. 56-61, 1986.

ELAZAKA, A. I. et al. New approach to removal of hazardous Bypass Cement Dust (BCD) from the environment: 20Na2O-20BaCl₂-(60-x)B₂O₃-(x)BCD glass system and Optical, mechanical, structural and nuclear radiation shielding competences. **Journal of Hazardous Materials**, v. 403, p. 123738, 2021.

EMBRAPA. **Manual de Métodos de Análise de Solo**. 2^a ed. Rio de Janeiro: Centro Nacional de Pesquisa de Solos, 1997.

FERREIRA, T. R. et al. Surface liming effects on soil radiation attenuation properties. **Journal of Soils and Sediments**, v. 18, p. 1641-1653, 2018.

HANAGODIMATH S. M.; MANOHARA S. R. Studies on effective atomic numbers and electron densities of essential amino acids in the energy range 1 keV-100 GeV. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research** B, v. 258, p. 321-328, 2007.

KAPLAN, I. Nuclear Physics. Boston: Addison-Wesley Publishing Company, 1997.

KER, J. C. et al. **Pedologia Fundamentos**. Sociedade Brasileira de Ciência do Solo, 2012.

KNOLL, G. F. Radiation and detection measurements. John Wiley & Sons Inc, Hoboken, 2010.

KUCUK, N.; TUMSAVAS, Z.; CAKIR, M. Determining photon energy absorption parameters for diferente soil samples. **Journal of Radiation Research**, v. 54, p. 578-586, 2013.

LAL, R.; SHUKLA, M. K. Principles of Soil Physics. New York: Marcel Dekker, 2004.

LESCH, I. F. Formação e Conservação dos Solos. 2ª ed. São Paulo: Oficina de Textos, 2010.

MARQUES, F. A. et al. Caracterização e classificação de Cambissolos do arquipélago de Fernando de Noronha, Pernambuco. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 31, p. 1023-1034, 2007.

MEDHAT, M. E. Studies on effective atomic numbers and electron densities in different solid state track detectors in the energy range 1 keV-100 GeV. **Annals of Nuclear Energy**, v. 38, p. 1252-1263, 2011.

MEDHAT, M. E. Comprehensive study of photon attenuation through different construction matters by Monte Carlo Simulation. **Radiation Physics and Chemistry**, v. 107, p. 66-74, 2015.

MEDHAT, M. E.; PIRES, L. F.; ARTHUR, R. C. J. Analysis of photon interaction parameters as function of soil composition. **Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry**, v. 300, p. 1105-1112, 2014.

MEDHAT, M. E.; PIRES, L. F. Importance of photo atomic cross section for studying physical properties of different types of soil. **X-ray Spectrometry**, v. 45, p. 202-206, 2016.

MELO, V. F. et al. Potássio e magnésio em minerais das frações areia e silte de diferentes solos. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 24, p. 269-284, 2000.

MOMOLI, R. S. et al. Conservação dos solos e ecoturismo no Parque Estadual da Serra Dourada, Goiás. **Geografia**, v. 46, p. 1-21, 2021.

MOREIRA, H. L.; OLIVEIRA, V. A. Evolução e gênese de um plintossolo pétrico concrecionário êutrico argissólico no município de Ouro Verde de Goiás. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 32, p. 1683-1690, 2008.

MOTTA, P. E. F. et al. Relações solo-superfície geomórfica e evolução da paisagem em uma área do Planalto Central Brasileiro. **Pesquisa Agropecuária brasileira de Brasília**, v. 37, p. 868-878, 2002.

MUDAHAR, G. S.; SAHOTA, H. S. Effective Atomic Number Studies in Different Soils for Total Photon Interaction in the Energy Region 10-5000 keV. **Applied Radiation and Isotopes**, v. 39, p. 1251-1254, 1988.

ONDRASEK, G. et al. Biogeochemestry of soil organic matter in agroecosystems and environmental implications. **Science of the Total Environment**, v. 658, p. 1559-1573, 2019.

PIRES, L. F.; BACCHI, O. O. S.; REICHARDT, K. Soil water retention curve determined by gamma-ray attenuation. **Soil Tillage Research**, v. 82, p. 89-97, 2005.

PIRES, L. F.; BACCHI, O. O. S.; REICHARDT, K. Gamma-ray beam attenuation to assess the influence of soil texture on structure deformation. **Nukleonika**, v. 51, p. 125-129, 2006.

PIRES, L. F. et al. Soil porous system changes quantified by analyzing soil water retention curve modifications. **Soil Tillage Resarch**, v. 100, p. 72-77, 2008.

PIRES, L. F.; PRANDEL, L. V.; SAAB, S. C. The effect of wetting and drying cycles on soil chemical composition and their impacto n bluk density evaluation: An analysis by using XCOM data and gamma-ray computed tomography. **Geoderma**, v. 213, p. 512-520, 2014.

PIRES, L. F.; MEDHAT, M. E. Different methods of mass attenuation coefficient evaluation: influences in the measurements of some soil physical properties. **Applied Radiation and Isotopes**, v. 111, p. 66-74, 2016.

PIRES, L. F. et al. Mineralogical composition of hardsetting soils and its effect on the radiation attenuation characteristics. **Journal of Soils and Sediments**, v. 16, p. 1059-1068, 2015.

PIRES, L. F. Soil analysis using nuclear techniques: A literature review of the gamma ray attenuation method. **Soil & Tillage Research**, v. 184, p. 216-234, 2018.

PIRES, L. F. et al. Radiation attenuation properties based on the quantification of soil components using the Rietveld Method. **Results in Physics**, v. 12, p. 2009-2011, 2019.

PIRES, L. F. et al. X-ray microtomography analysis of soil pore structure dynamics under wetting and drying cycles. **Geoderma**, v. 362, p. 114103, 2020.

PRANDEL, L. V. Integração de Métodos de Caracterização Mineralógica de Solos Cauliníticos. Tese (Doutorado em Ciências – Área de concentração: Física) Universidade Estadual de Ponta Grossa, Ponta Grossa, 2015.

PRANDEL, L. V. et al. Can the Granulometric Soil Fractions Attenuate the Radiation Differently from the Whole Soil? **Brazilian Archives of Biology and Technology**, v. 64, p. 1-10, 2021.

PRANDEL, L. V. et al. Mineralogical analysis of clays in hardsetting soil horizons, by X-ray fluorescence and X-ray diffraction using Rietveld method. **Radiaition Physcis and Chemestry**, v. 95, p. 65-68, 2014.

R Core Team. R: a language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing. Vienna, Áustria, 2016.

RESENDE, M. et al. **Mineralogia de solos brasileiros: interpretação e aplicações**. 2^a ed. Lavras: UFLA, 2011.

ROCHA, W. W. et al. Resistência e cisalhamento e grau de intemperismo de cinco solos na região de Lavras (MG). **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 26, p. 297-303, 2002.

SANTOS, A. C. et al. Gênese e classificação de solos numa topossequência no ambiente de mar de morros de médio vale do Paraíba do Sul, RJ. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 34, p. 1297-1314, 2010.

SANTOS, H. D. et al. Sistema Brasileiro de Classificação dos Solos. 5ª ed. EMBRAPA, 2018.

SINGH V. P.; MEDHAT, M. E.; SHIRMARDI, S. P. Comparative studies in shielding properties of some steel alloys using Geant4, MCNP, WinXCOM and experimental results. **Radiation Physics and Chemistry**, v. 106, p. 255-260, 2015.

SINGH V. P.; MEDHAT, M. E. Geant4 Monte Carlo code application in photon interaction parameter of composite materials and comparison with XCOM and

experimental data. Indian Journal of Pure & Applied Physics, v. 54, p. 137-143, 2016.

SIMÕES, L. S. A. **Geologia do Grupo Araxá na Região de Mossâmedes-Goiás e as ocorrências Minerais Associadas**. Dissertação (Mestrado em Geociências) Universidade de Brasilia, Brasiília, 1984.

TAVARES FILHO, J. Física e conservação do solo e água. Londrina: Eduel, 2016.

TECH, L. et al. Elemental and radiation attenuation parameter analyses to characterize a Cambisol from the Serra Dourada State Park, Brazil. **Environmental Earth Sciences**, v. 81, p. 63, 2022.

TEKIN, H. O. MCNP-X Monte Carlo Code Application for Mass Attenuation Coefficients of Concrete at Different Energies by Modeling 3 X 3 Inch Nal(TI) Detector and Comparison with XCOM and Monte Carlo Data. **Science and Technology of Nuclear Installations**, v. 2016, p. 7, 2016.

TEKIN, H. O. et al. Sodium dodecatungstophosphate hydrate-filled polymer composities for nuclear radiation shielding. **Material Chemistry and Physics**, v. 256, p. 123667, 2020.

TIMM, L. C. et al. Soil bulk density evaluation by conventional and nuclear methods. **Australian Journal of Soil Research**, v. 43, p. 97-103, 2005.

TIMM, L. C. et al. Field spatial and temporal patterns of soil water content and bulk density changes. **Science Agriculture**, v. 63, p. 55-64, 2006.

WENDROTH, O.; REUTER, H. I.; KERSEBAUM, K. C. Predicting yield of barley across a landscape: a state-space modeling approach. **Journal of Hydrology**, v. 272, p. 250-263, 2003.

4 CARACTERIZAÇÃO DE UM NEOSSOLO QUARTZARÊNICO DA AMAZÔNIA ORIENTAL SUBMETIDO A DIFERENTES USOS POR MEIO DE PARÂMETROS DE INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO

RESUMO

Os solos da Amazônia Oriental se caracterizam por serem solos jovens, em fase de formação, conhecidos por Neossolos. Estes são caracterizados pela textura mais arenosa, ausência de horizonte diagnóstico e presença de material da rocha de origem e de minerais de difícil intemperização. Devido ao grande crescimento populacional, tem se tornado comum a diminuição de áreas de preservação ambiental visando mineração e exploração agropecuária. Na Amazônia é comum os agricultores familiares utilizarem técnicas convencionais para o manejo do solo. Porém, esta região é caracterizada por solos com estrutura frágil. Desta forma, este estudo visou avaliar os parâmetros de interação da radiação em dois sistemas de uso do solo, Pasto e Roça de Toco, sendo que uma área sob Mata foi considerada referência. O principal objetivo foi analisar como esses usos do solo afetam a sua composição química, e consequentemente os parâmetros de interação da radiação. O solo estudado foi um Neossolo Quartzarênico oriundo de um assentamento de agricultura familiar localizado na região da Amazônia Oriental. As análises foram conduzidas em quatro camadas distintas (0-5, 5-10, 10-20 e 20-40 cm), a fim de se analisar o efeito dos usos em profundidade. A caracterização química do solo foi obtida por meio da técnica de fluorescência de raios X por dispersão de comprimento de onda (WDXRF). Com base na composição guímica, utilizou-se o programa XCOM para obtenção do coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ) e dos demais parâmetros de interação da radiação (seções de choque molecular (σ_M), atômica (σ_A), eletrônica (σ_E), número atômico efetivo (Z_{eff}) e densidade eletrônica (Nel)). Os resultados mostraram que o sistema de cultivo Roça de Toco apresentou diminuição significativa dos óxidos Al₂O₃, Fe₂O₃ e TiO₂ nas primeiras camadas (0-5 cm e 5-10 cm), e aumento significativo do óxido SiO2, quando comparado com a Mata. Entretanto, nas camadas mais inferiores do solo (10-20 cm e 20-40 cm) os óxidos majoritários da Roça de Toco passaram a apresentar concentrações muito semelhantes à referência. O uso Pasto mostrou menores concentrações, em todas as camadas analisadas, do óxido Al2O3 quando comparados com os valores da referência. Foi possível observar que a tendência de variação de µ/p estava relacionado com a tendência de variação dos valores dos óxidos Fe₂O₃ e TiO₂ para todas as camadas. Os parâmetros σ_A , σ_E e Z_{eff} apresentaram a mesma tendência de variação do óxido Fe₂O₃. Já $\sigma_{\rm M}$ mostrou dependência com o peso atômico e o número de fórmulas unitárias das moléculas do solo, principalmente para o óxido SiO₂. Já o parâmetro N_{el} mostrou tendência de variação similar à observada no conteúdo do óxido SiO2. Os resultados obtidos evidenciam que os usos afetaram a composição química do Neossolo estudado, principalmente com relação aos óxidos relacionados aos minerais secundários. As mudanças ocorridas na composição química do solo tiveram influências diretas nos parâmetros de interação da radiação; de modo que a análise detalhada de cada um desses parâmetros possibilitou novos insights acerca de como o conteúdo de óxidos é afetado pelos diferentes usos do solo, e como a ação antrópica pode afetar propriedades do solo que refletem em seus parâmetros de interação da radiação com a matéria.

Palavras chave: Amazônia Oriental, WDXRF, seções de choque, coeficiente de atenuação de massa, número atômico efetivo.

ABSTRACT

The soils of the Eastern Amazon are characterized as young soils, in the formation phase, known as Entisols. These soils are characterized by a sandy texture, absence of diagnostic horizon and presence of source rock material and minerals that are difficult to weather. Due to the great population growth, it has become common to increase the pressure for the reduction of areas of environmental preservation aiming at mining and agricultural exploitation. In the Amazon it is common for family farmers to use conventional techniques for soil management. However, the places where these farmers work are characterized by soils with fragile structure, as is the case of Entisols. Thus, this study aimed to evaluate the radiation interaction parameters in two land use systems, Pasto and Roca de Toco, and an area Mata was considered a reference. The main objective was to analyze how these land uses affect their chemical composition, and consequently the parameters of radiation interaction. The studied soil was a Quartzipsamments Entisol from a family farming settlement located in the Eastern Amazon region. The analyzes were carried out in four different layers (0-5, 5-10, 10-20 and 20-40 cm), in order to analyze the effect of uses in depth. Soil chemical characterization was obtained using the wavelength scattering X-ray fluorescence technique (WDXRF). Based on the chemical composition, the XCOM program was used to obtain the mass attenuation coefficient (μ/ρ) and the other radiation interaction parameters (molecular (σ_M), atomic (σ_A), electronic (σ_E)) cross sections, effective atomic number (Zeff) and electronic density (Nel)). The results showed that the Roça de Toco cultivation system showed a significant decrease in Al₂O₃, Fe₂O₃ and TiO₂ oxides in the first layers (0-5 cm and 5-10 cm), and a significant increase in SiO₂ oxide, when compared to Mata. However, in the lower soil layers (10-20 cm and 20-40 cm) the majority oxides from Roça de Toco started to present concentrations very similar to the reference. The use of Pasto showed lower concentrations, in all analyzed layers, of Al₂O₃ oxide when compared to the reference values. It was possible to observe that the trend of variation of μ/ρ was related to the tendency of variation of the values of Fe₂O₃ and TiO₂ oxides for all layers. The parameters σ_A , σ_E and Z_{eff} showed the same variation tendency of the oxide Fe₂O₃. On the other hand, σ_M showed dependence on the atomic weight and the number of unitary formulas of the soil molecules, mainly for the SiO₂ oxide. The Nel parameter, on the other hand, showed a variation trend similar to that observed in the SiO₂ oxide content. The results obtained show that the uses affected the chemical composition of the studied Entisol, mainly in relation to the oxides related to secondary minerals. Changes in soil chemical composition had direct influences on radiation interaction parameters; so that the detailed analysis of each of these parameters allowed new insights on how the content of oxides is affected by different land uses, and how human action can affect soil properties that reflect in its radiation interaction parameters with the matter.

Key words: Eastern Amazon, WDXRF, mass attenuation coefficient, cross sections, effective atomic number.

4.1 INTRODUÇÃO

Segundo o IBGE (2020) a Amazônia Legal é composta pelos estados do Acre, Rondônia, Roraima, Amazonas, Pará, Maranhão, Amapá, Tocantins e Mato Grosso. Possui uma área de superfície de 5.015.067,75 km² correspondendo a aproximadamente 58,9% do território brasileiro. A parte oriental da Amazônia abriga 20% do bioma Cerrado e parte do Pantanal Mato-Grossense.

A cobertura pedológica da região da Amazônia Oriental é, de modo geral, caracterizada por solos ácidos, como os Neossolos, com capacidade reduzida de disponibilidade de água para as plantas. Em tais condições, o sistema retém a maior parte de seus nutrientes na sua biomassa e sua exuberância é fundamentada num processo de reciclagem de nutrientes com ciclo quase fechado, tudo que se produz se consome, que se contrapõe à lixiviação no perfil dos solos pelas precipitações intensas, frequentes e características da região (FERREIRA et al., 2006).

Os Neossolos são solos pouco evoluídos, sem horizonte B diagnóstico definido, constituídos por material mineral em sua maioria. Este solo está em vias de formação, seja pela reduzida atuação dos fatores de formação (clima, relevo, tempo, regime termal e ação de organismos vivos) de um solo ou, então, pela característica do material de origem (minerais de difícil intemperização) (LEPSCH, 2010).

O critério de definição para a classificação de um Neossolo é a insuficiência de expressão dos atributos diagnósticos que caracterizam os diversos processos de formação do solo e quase nenhuma diferenciação entre os horizontes. O horizonte A é geralmente seguido do C ou R (rocha de origem), possuindo fragmentos de rocha ou do material de origem. Alguns solos podem ainda apresentar horizonte B, mas com insuficiência de requisitos (espessura muito pequena, por exemplo) para caracterizar qualquer tipo de horizonte B diagnóstico (SANTOS et al., 2018).

Os Neossolos Quartzarênicos são solos sem contato lítico (rocha de origem) ou lítico fragmentado dentro de 50 cm a partir da superfície, e possuem sequência de horizontes A-C. Apresentam textura arenosa ou areia franca em todos os horizontes até, no mínimo, a profundidade de 150 cm a partir da superfície do solo ou até o contato lítico ou lítico fragmentário. Esses solos são essencialmente quartzosos, possuindo na fração areia (0,053-2 mm) 95% ou mais de quartzo, calcedônia e opala e praticamente ausência de minerais primários alteráveis (menos resistentes ao intemperismo) (SANTOS et al., 2018).

Aliado aos anseios de melhoria na qualidade de vida da humanidade, o crescimento populacional impõe grande pressão sobre os recursos naturais, o que tem elevado o número de desmatamentos em novas áreas a fim de incorporá-las ao processo produtivo. Converter estas áreas em agrossistemas implica na redução da biomassa, levando ao desequilíbrio do processo de reciclagem de nutrientes e a redução de matéria orgânica no solo. Como consequência, nos solos da Amazônia em geral, há a exposição do solo aos efeitos da lixiviação, favorecida pela alta permeabilidade do solo associada às precipitações torrenciais e temperaturas elevadas, tornando o intemperismo mais intenso. Tais consequências são mais evidentes quando o solo é preparado por técnicas de manejo convencionais (aração e gradagem) e também na agricultura de corte e queima da vegetação natural (FREITAS et al., 2013).

Segundo Abreu (2013), na Amazônia a preparação de áreas de cultivo pela agricultura familiar é feita, em geral, com uso do sistema de derrubada e queima, o que provoca impactos ambientais nos ecossistemas onde esse modo de uso é empregado. Esse sistema de agricultura mantém níveis de sustentabilidade que vão diminuindo com o tempo na medida em que as queimadas se repetem e o tempo de pousio é reduzido.

Conforme o Artigo 1°, da Resolução n.º 001/86, do Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA), impacto ambiental refere-se a qualquer alteração das propriedades físicas, químicas, biológicas do meio ambiente, causada por qualquer forma de matéria ou energia resultante das atividades humanas que afetem diretamente ou indiretamente: a saúde, a segurança, e o bem estar da população; as atividades sociais e econômicas; a biota; as condições estéticas e sanitárias ambientais; e a qualidade dos recursos ambientais.

Os agricultores familiares da Amazônia usam fogo em sua atividade por não conhecerem alternativas viáveis de trabalhar com o solo (ABREU, 2013). A situação se torna ainda mais crítica, pois a maior parte dos assentamentos de agricultura familiar foi construída em solos de estrutura frágil, como os Neossolos Quartzarênicos (FREITAS, 2013). A falta de recursos, tecnologias, pesquisas e modernização de maquinários, fizeram com que os produtores das regiões que compõem a Amazônia Oriental optassem por este modo de preparo rudimentar do solo (FREITAS et al., 2015).
No estado do Maranhão, grandes áreas correspondentes a Amazônia Oriental, encontram-se degradadas pela alteração da estrutura vegetal e pelas alterações nos indicadores de qualidade do solo. Como principais causas da degradação desse ambiente devem ser consideradas a ausência de alternativas tecnológicas ao sistema de derrubada e queima, concomitante ao caráter predatório da exploração das áreas destinadas às pastagens (ABREU, 2013).

As práticas antigas de agricultura de corte e queima permitem o cultivo em solos ácidos e inférteis que dominam grande parte da Amazônia. A queima transforma a biomassa florestal em cinzas ricas em nutrientes que fertilizam o solo. Essa fertilidade, no entanto, é temporária. Os rendimentos oriundos dos cultivos frequentemente declinam entre um e três anos após a derrubada da floresta. Os produtores então abandonam estas áreas em pousio florestal para formação de capoeiras, com uma diversidade biológica e biomassa mais pobre quando comparada com as florestas intocadas. Assim, a cada ano uma nova área de floresta é derrubada e queimada pelas famílias de agricultores carentes da Amazônia para que haja garantia de continuidade na produção de subsistência (ABREU, 2013; FREITAS, 2013).

Quando a produtividade da lavoura começa a dar sinais de desgaste, ou ao final dos primeiros dois anos de cultivo, muitos dos pequenos proprietários rurais plantam pastagem e iniciam a introdução de capins. Esta cultura não é imediatamente implantada após a derrubada e a queima da floresta, geralmente se inicia com culturas de subsistência. Assim, as culturas que requerem níveis de nutrientes mais altos do que as espécies de capim são beneficiadas pelo uso de nutrientes fornecidos pelas cinzas após a queimada (NEPSTAD et al., 1999).

Há inúmeros estudos na literatura que exploram as propriedades físicas do solo, sejam elas com métodos convencionais, descritos nos manuais da EMBRAPA (EMBRAPA, 1997), ou então utilizando métodos não convencionais, como o uso da radiação gama. Neste último, podemos citar os métodos experimentais, com o uso de fontes de radiação gama (geralmente ²⁴¹Am ou ¹³⁷Cs, dependendo da densidade e tamanho da amostra) e métodos baseados em simulações computacionais como Monte Carlo ou baseados na regra da mistura (XCOM) ou por meio de medidas de fluorescência de raios X. Com relação aos métodos baseados em simulação computacional, o XCOM é utilizado com frequência como uma forma de validar as

medidas obtidas experimentalmente do coeficiente de atenuação de massa e por meio das simulações de Monte Carlo (MEDHAT, 2015).

No entanto, existem poucos estudos quando se aborda os parâmetros de interação da radiação, obtidos por métodos experimentais ou baseados em simulação (XCOM), tratando de solos relativamente jovens, rasos, com pouca atividade de intemperismo e com predominância de minerais de difícil intemperização. Inexistem estudos analisando solos em áreas de grande sensibilidade e apelo de preservação ambiental e submetidos a práticas de plantio altamente antrópicas, como é o caso do corte e queima da vegetação. Estudos empregando os parâmetros de interação da radiação podem se mostrar sensíveis a mudanças, mesmo que sutis, na composição química elementar de solos mais jovens, como no caso dos Neossolos. Portanto, estes parâmetros podem trazer novos resultados para a caracterização desses solos.

Os parâmetros de interação da radiação utilizados na caracterização do Neossolo, especificamente, foram o coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ), as seções de choque molecular (σ_M), atômica (σ_A), eletrônica (σ_E), o número atômico efetivo (Z_{eff}) e a densidade eletrônica (N_{el}). Esses parâmetros ajudam a entender como ocorrem os processos de absorção e espalhamento de fótons em materiais multielementares como é o caso do solo (YILMAZ; GÜROL, 2021).

O coeficiente de atenuação linear fornece uma medida do quanto um determinado elemento ou composto absorve ou espalha os fótons por unidade de comprimento. As diferentes seções de choque estão relacionadas com a medida da probabilidade de que os fótons interajam com o material estudado por processos específicos de interação (efeito fotoelétrico, efeito Compton e produção de pares). Essas interações irão ocorrer com as moléculas que compõe o solo, os átomos que compõe essas moléculas e os elétrons presentes nos átomos. O número atômico efetivo representa uma média dos números atômicos dos elementos que constituem o solo, ao passo que a densidade eletrônica está relacionada com a probabilidade de se encontrar os elétrons em locais específicos dentro do composto estudado, neste caso, o solo (PIRES, 2018; KAPLAN, 1997).

Geralmente, os estudos conduzidos para análise dos parâmetros de interação da radiação, trazem apenas as discussões para μ/ρ , Z_{eff} e N_{el}. Recentemente, Carmargo et al. (2022) e Tech et al. (2022b) trouxeram novas discussões sobre o

papel da seção de choque molecular em sua variação em função da composição química de solo, mostrando que este parâmetro pode se mostrar tão sensível a mudanças na composição química, quanto os parâmetros geralmente analisados (µ/p, Z_{eff} e N_{el}). Kodum (2021) apresentou uma análise detalhada dos parâmetros de interação da radiação para um Neossolo Litólico oriundo de uma unidade de conservação, fornecendo mais discussões sobre a importância do estudo dos parâmetros de interação da radiação neste tipo de solo.

Desta forma, o objetivo deste estudo é avaliar como práticas antrópicas de uso do solo (Pasto e Roça de Toco) afetam a sua composição química elementar e como tais variações afetam os parâmetros de interação da radiação. O estudo foi realizado em um Neossolo Quartzarênico oriundo de um assentamento de agricultura familiar localizado na região da Amazônia Oriental. Todas as análises foram conduzidas em quatro camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm), a fim de avaliar também, até que camada o Neossolo submetido aos diferentes usos, difere na composição química elementar e nos valores dos parâmetros de interação da radiação quando comparados a área sob de referência (Mata). Tal análise é interessante por possibilitar verificar até que profundidade os diferentes usos do solo podem ter impacto.

Por fim, além dos objetivos listados anteriormente, o estudo apresentado neste capítulo pretende responder as seguintes hipóteses: 1) diferentes usos do solo alteram sua composição química de modo a afetar os parâmetros de interação da radiação, de maneira que estes não possam ser considerados estáticos mesmo para um mesmo tipo de solo e 2) solos jovens pouco desenvolvidos (ausência de horizontes bem definidos) apresentam diferenças na composição química do solo e nos parâmetros de interação da radiação ao longo do perfil.

4.2 MATERIAIS E MÉTODOS

Área experimental, manejos e coleta do solo

A área experimental estava localizada no lote 52 do assentamento Tobasa, em Esperantina, Estado do Tocantins, nas coordenadas 5° 22' 02" de latitude sul, 48° 35' 57" de longitude a oeste e 90 m acima do nível do mar (Figura 4.2.1). A precipitação média local é de 1.500 mm ano⁻¹ e a temperatura média de 28,5°C. O clima é classificado como Aw (Köppen), com seis meses de período chuvoso (dezembro a maio) e seis meses de período seco (junho a novembro).

O solo da área foi classificado como Neossolo Quartzarênico Órtico (RQ_o) conforme classificação da Sociedade Brasileira de Ciência do Solo (SiBCS) (SANTOS et al., 2018). O Neossolo possui quatro subordens, sendo uma delas o Quartzarênico. Dentro do Neossolo Quartzarênico há dois grandes grupos e pelas análises realizadas em laboratório, o Neossolo Quartzarênico estudado não preenche os requisitos de um Neossolo Quartzarênico Hidromorfo, portanto o grande grupo do Neossolo estudado é Órtico.

Figura 4.2.1 - Mapa da localização do Estado do Tocantins e da região na qual se encontra o lote 52 localizado no município de Esperantina (TO) e imagem do município atualmente extraída do Google Earth.





Fonte: A autora/Adaptado de Google Earth.

Quando as amostras foram coletadas para este estudo o solo se encontrava sob três usos distintos, sendo eles: 1) Pasto (PA), implantado em 1989 com capim marmelada (Brachiara plantaginea). A área total sob este uso era de 16 hectares, usada no pastejo de bovinos, equinos e ovinos, mantendo uma pressão de pastejo constante de 0,8 unidade animal (UA) por hectare (1UA = 450 kg de peso vivo); 2) Roça de Toco (RT), implantado em uma área de 2,5 hectares, sendo caracterizado pela retirada da floresta nativa, que teve sua fitomassa seca queimada em 2009. A área foi utilizada para o cultivo de arroz (Oryza sativa), milho (Zea mays), feijão trepa-pau (Vigna unguiculata) e mandioca (Manihot esculenta) até maio de 2010. Todas as espécies foram cultivadas na forma de consórcio e a área foi mantida em pousio pós colheita até o momento da coleta das amostras; e 3) Mata (MA), área sob mata nativa do tipo floresta aberta, com expressivo estoque de biomassa aérea. Essa área foi usada como referência e estava localizada ao lado da área sob roça de toco. A área é utilizada como reserva onde, eventualmente, é colhida lenha e madeira, para o fabrico de casas para moradia, além da existência de frutas nativas da região. Todos os agroecossistemas foram iniciados com o corte e queima da vegetação natural. Não há registro do uso de mecanização nem de adubos para nenhum dos sistemas estudados.

Segundo Freitas (2013), para a análise textural (Tabela 4.2.1), as amostras foram secas ao ar até atingirem massa constante, na sequência foram destorroadas e passadas em peneira com abertura de 2 mm (10 *mesh*) para análise posterior pelo método do densímetro em acordo com o Manual de Métodos de Análise do Solo (EMBRAPA, 1997).

quatro camadas analisadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm).					
Camada	Uso	Argila (%)	Silte (%)	Areia (%)	Classe textural
0-5 cm	MA	11,3	4,4	84,3	Areia franca
	PA	11,7	4,3	84,0	Areia franca
	RT	12,3	6,0	81,7	Areia franca
5-10 cm	MA	13,3	4,2	82,5	Areia franca
	PA	11,3	4,7	84,0	Areia franca
	RT	12,6	5,4	82,0	Areia franca
10-20 cm	MA	13,3	4,3	82,4	Areia franca
	PA	12,0	3,9	84,1	Areia franca
	RT	12,7	5,3	82,0	Areia franca

Tabela 4.2.1 - Valores médios das partículas de argila, silte e areia (%) e classe textural dos solos sob os dois usos, Pasto (PA) e Roça de Toco (RT), e a área de referência sob Mata (MA) para as quatro camadas analisadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm).

20-40 cm	MA	13,7	4,4	81,9	Areia franca
	PA	12.3	3.4	84.3	Areia franca
	RT	14,1	4,2	81,7	Areia franca

Fonte: Adaptado de Freitas (2013).

Para a amostragem foi aberta uma mini trincheira em cujas paredes foram coletados monólitos de solo de 5x20x20 cm nas camadas de 0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm os quais foram envolvidos em filme plástico.

Fluorescência de raios X (WDXRF)

Para análise de fluorescência de raios X por comprimento de onda (WDXRF), realizada em um equipamento da marca Rigaku, modelo ZSX Primus II, foram analisadas três amostras para cada uma das camadas do solo. As amostras foram maceradas em pistilos e submetidas a peneiramento em malha de 45 µm. Foram pesadas cerca de 0,5 g destas amostras para serem prensadas com força de 60 kN por 1 minuto para obtenção de pastilhas. Para as amostras do método de plantio Roça de Toco foi necessário acrescentar 0,1 g de ácido bórico H₃BO₃ como aglutinante para auxiliar na confecção da pastilha, pois a textura arenosa do solo dificultou a sua confecção. Após o preparo, as amostras foram levadas para análise da composição química elementar no formato de óxido nas faixas de comprimento de onda característico de Flúor a Urânio. Foram obtidas três medidas de cada camada (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm) para cada plantio (Pasto e Roça de Toco) e para a referência (Mata) totalizando 36 amostras (3x3x4). A comparação entre as variações dos valores dos óxidos e dos parâmetros de interação foi realizada com base no desvio padrão das medidas.

Programa XCOM

O programa XCOM usa como entrada de dados a composição química das amostras de interesse, com isso, o programa gera seções de choque para o efeito fotoelétrico, os espalhamentos coerente e incoerente (efeito Compton), assim como o processo de produção de pares. Com base nas seções de choque para cada um dos efeitos individuais é obtido o coeficiente de atenuação de massa total, com espalhamento incoerente e coerente, para qualquer elemento, composição e misturas, na faixa de energia de 1 keV a 100 GeV. Os valores do coeficiente de atenuação são utilizados para o cálculo dos demais parâmetros de interação, como a seção de choque molecular (FERREIRA et al., 2018):

$$\sigma_M = \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{M}{N_A} \right) \tag{4.2.1}$$

onde, $M = \sum_{i} n_i A_i$ é o peso molecular do composto, N_A é o número de Avogadro, A_i é o peso atômico do *i*th elemento e n_i é o número de fórmulas unitárias da molécula.

Os valores da seção de choque atômica são obtidos através da equação:

$$\sigma_A = \frac{\sigma_M}{\sum_i n_i} \tag{4.2.2}$$

onde, $\sum_i n_i$ é o número total de unidades de fórmula do composto.

E os valores da seção de choque eletrônica são obtidos por meio da equação (PIRES, 2018):

$$\sigma_E = \frac{1}{N_A} \sum \frac{f_i A_i}{Z_i} \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i \tag{4.2.3}$$

onde, $f_i = \frac{n_i}{\sum_j n_j}$ e Z_i são a abundância fracional e o número atômico do *i*th elemento constituinte e $\sum_j n_j$ o número total de átomos presente na fórmula molecular.

O número atômico efetivo é calculado a partir da seguinte relação (DEMIR et al., 2013):

$$Z_{eff} = \frac{\sigma_A}{\sigma_E} \tag{4.2.4}$$

e a densidade eletrônica é obtida a partir da equação:

$$N_{el} = \frac{\mu/\rho}{\sigma_E} \tag{4.2.5}$$

Neste estudo foi selecionada a faixa de energia de 1 keV a 100 MeV, com a energia de 59,5 keV, que corresponde à fonte de ²⁴¹Am, utilizada para fins de comparação entre as camadas do solo analisado. Esta energia foi selecionada apenas como caráter de referência, pois a fonte radioativa de ²⁴¹Am é uma das mais

utilizadas na ciência aplicada a solos. Os dados da composição química do solo obtidos por WDXRF foram usados na obtenção dos coeficientes de atenuação de massa. Para cada camada analisada foram obtidas três medidas por meio do programa XCOM.

4.3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Conteúdos de óxidos

A Tabela 4.3.1 traz os resultados dos óxidos mais abundantes encontrados no Neossolo sob os diferentes usos e a referência, medidos pelo método de fluorescência de raios X por dispersão de comprimento de onda.

As discussões serão conduzidas da seguinte maneira: primeiro serão analisadas as camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm) e em cada uma delas será discutido os óxidos mais abundantes (SiO₂, Al₂O₃, Fe₂O₃, TiO₂) presentes nesta camada, comparando os valores dos usos Pasto e Roça de Toco com a Mata. A apresentação dos resultados para os parâmetros de interação da radiação irá seguir o mesmo padrão.

Óxido (%)	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	TiO ₂
MA (cm)				
0-5	64,00	30,07	2,27	1,74
	(0,43)	(0,51)	(0,06)	(0,19)
5-10	66,10	28,77	2,23	1,93
	(2,8)	(2,32)	(0,27)	(0,12)
10-20	67,03	28,13	2,11	1,87
	(0,95)	(0,76)	(0,11)	(0,03)
20-40	62,77	31,87	2,47	2,31
	(0,11)	(0,05)	(0,12)	(0,09)
PA (cm)				
0-5	75,07	17,80	3,45	1,43
	(1,58)	(1,49)	(0,53)	(0,15)
5-10	66,97	24,23	5,55	2,02
	(2,69)	(2,01)	(0,45)	(0,08)
10-20	79,27	15,63	3,30	1,47
	(0,58)	(0,49)	(0,11)	(0,14)
20-40	73,27	20,47	4,21	1,47
	(3,45)	(2,60)	(0,65)	(0,26)
RT (cm)				
0-5	89,00	9,09	0,75	0,59
	(0,60)	(0,67)	(0,05)	(0,06)
5-10	91,73	7,07	0,50	0,66
	(6,62)	(5,53)	(0,36)	(0,31)
10-20	78,63	18,17	1,28	1,34
	(8,80)	(7,35)	(0,54)	(0,66)
20-40	67,33	28,27	1,76	1,90
	(0,50)	(0,30)	(0,02)	(0,14)

Tabela 4.3.1 - Valores médios dos óxidos mais abundantes do solo, seguidos pelo desvio padrão (valores entre parênteses), obtidos pelo método da fluorescência de raios X por comprimento de onda (WDXRF), para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT) para as quatro camadas estudadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm).

Na camada 0-5 cm, para o óxido SiO₂, a menor concentração é na Mata, seguido pelo uso Pasto e então pelo uso Roça de Toco. Para o Al₂O₃, podemos observar o contrário, sendo a maior concentração na referência, seguido pelo uso Pasto e então pela Roça de Toco. Para o Fe₂O₃, podemos observar que a menor concentração da camada superficial está na Roça de Toco, seguido pela referência e Pasto. Para o TiO₂, há uma diminuição significativa no valor de concentração deste óxido para a Roça de Toco e não há diferença significativa entre a referência e Pasto. Pode-se observar então que a Roça de Toco, quando comparada com a referência, apresenta maior quantidade de SiO₂ que é o principal componente formador do mineral quartzo (VAN LIER et al., 2006).

A formação de minerais secundários se dá pela evolução da formação do solo através do intemperismo de minerais primários, como os silicatos (SiO₂). Como já dito, os Neossolos são solos mais jovens e em fase inicial de formação (SANTOS et al., 2018). Os minerais presentes na fração argila, ou seja, os minerais secundários do solo, podem se ligar, em sua maioria, aos óxidos Al₂O₃ e Fe₂O₃, podendo haver a ocorrência de ligação com os óxidos TiO₂ e MgO também (RESENDE et al., 2011).

Os minerais secundários, juntamente com a matéria orgânica (REGELINK et al., 2015), e os óxidos Al₂O₃ e Fe₂O₃ (entre outros) são os principais responsáveis pela agregação do solo (XUE et al., 2019). Estes, agem favorecendo a estruturação do solo para que este seja capaz de permitir a infiltração e retenção de água pelas plantas, a absorção de nutrientes pelo solo, e a formação de agentes cimentantes, de modo a evitar processos erosivos em regimes onde o clima favorece grandes volumes de chuvas (HILLEL, 1998).

Na camada 5-10 cm, para o SiO₂ observa-se que a diferença entre os conteúdos de óxidos se dá apenas na Roça de Toco, onde novamente a concentração deste óxido é maior neste uso do solo, sendo aproximadamente 25% maior em relação a referência. Já para o Al₂O₃, nota-se que a concentração deste óxido é menor na Roça de Toco, aproximadamente 22% menor em relação a referência, aumentando no Pasto e na referência.

Para o Fe₂O₃, observa-se o mesmo comportamento da camada superficial, com o Pasto tendo uma concentração de ~3% maior que a Mata. E na camada 5-10 cm para o TiO₂, verifica-se o mesmo comportamento da camada 0-5 cm, a concentração para este óxido na Roça de Toco tem uma diminuição significativa no valor de concentração de aproximadamente 34% em comparação com a Mata. É possível verificar que o efeito da queimada da vegetação do solo na Roça de Toco afeta esta camada (5-10 cm), subjacente à camada superficial do solo, uma vez que foram verificadas variações significativas dos principais óxidos presentes nas frações areia, silte e argila.

Na camada de 10-20 cm, para o SiO₂ observa-se que a única diferença entre os usos do solo é para a Mata, onde este óxido apresenta menor valor de concentração comparado com os demais usos. O mesmo pode ser observado para o Al₂O₃, onde só há diferença de concentração na Mata, na qual o valor de concentração é maior para a referência quando comparado com os demais usos. O

Fe₂O₃ apresentou o mesmo comportamento das camadas superiores, tendo maior valor de concentração no Pasto, seguido da Mata e Roça de Toco. Já TiO₂ apresentou diferença de concentração apenas entre a Mata e o Pasto, com maior concentração na referência.

Na camada 20-40 cm, para o SiO₂ verifica-se um aumento significativo desse óxido no Pasto, seguido pela Roça de Toco e pela Mata. Para o Al₂O₃, a referência possui maior valor de concentração, seguido pela Roça de Toco e pelo Pasto. O Fe₂O₃ segue a mesma ordem de concentração das camadas superiores, maior concentração no Pasto, seguida pela Mata e pela Roça de Toco. Já o TiO₂ segue a ordem de maior concentração na Mata, seguido pela Roça de Toco e pelo Pasto.

Na camada mais inferior do solo, os valores de concentrações dos óxidos nos diferentes usos se assemelham muito com os valores da referência. O que mostra que os impactos dos usos Pasto e Roça de Toco, sobre o Neossolo se estendem somente nas camadas mais superficiais do solo (0-5 cm e 5-10 cm); a partir da camada 10-20 cm os valores dos óxidos Al₂O₃, Fe₂O₃ e TiO₂ no uso Roça de Toco, por exemplo, já começam a mostrar aumentos significativos, quando comparados com as camadas superficiais.

Já o óxido SiO₂ apresentou uma diminuição significativa a partir da camada 10-20 cm em ambos os usos, Pasto e Roça de Toco, aproximando dos valores de SiO₂ observados para a Mata. É possível observar, entretanto, que o óxido Al₂O₃, para o uso Pasto, manteve intervalo de concentração entre 17-24%, mostrando uma diferença significativa dos valores de concentração para o mesmo óxido (Al₂O₃) para a Mata (28-31%).

Os valores de concentração da composição química elementar encontrados neste trabalho estão em conformidade com Yanaguisawa (2019) que estudou os horizontes A-C de um Neossolo Flúvico de textura franco arenosa. Entretanto, neste trabalho o autor focou as análises somente nos minerais encontrados no Neossolo estudado. Em Kodum (2021), que estudou os horizontes de um Neossolo Litólico de origem Quartzo-Xisto ou Quartzito, é possível observar diferentes valores de concentração dos óxidos encontrados em relação ao Neossolo Quartzarênico, estudado neste trabalho. Entretanto, este fato se deve à subordem do Neossolo (Litólico), sua textura e também pelo Neossolo Litólico ser oriundo de uma unidade de conservação e sob o abrigo de uma caverna.

O alto desvio padrão observado para alguns óxidos pode estar associado a moagem do solo. As camadas analisadas do Neossolo possuem alta concentração de areia e o uso Roça de Toco possui uma alta concentração de matéria orgânica devido a queima de biomassa. Portanto, é difícil separar a fração areia da matéria orgânica na moagem, dado que os grãos de areia geralmente estão misturados, e alguns encobertos por material orgânico. Portanto, os altos desvios padrão observados podem ter sido ocasionados pela variabilidade entre o conteúdo de areia dos solos e a matéria orgânica, dado que no processo de moagem e preparo da amostra, a matéria orgânica é muito menos friável que as partículas de areia.

Coeficiente de atenuação de massa

A composição elementar do solo possibilitou por meio do código computacional XCOM a obtenção do coeficiente de atenuação de massa. A eficiência deste método na obtenção do coeficiente de atenuação já está extensivamente documentado em inúmeros trabalhos científicos (HAN et al., 2009; KURUDIREK et al., 2010; KUCUK et al., 2013; MEDHAT et al., 2014; SINGH et al., 2014; FERREIRA et al., 2018; PIRES et al., 2019; CAMARGO et al., 2021; PRANDEL et al., 2021; TECH et al., 2022b). O programa XCOM é geralmente utilizado na simulação de μ/ρ e também de μ/ρ devido às seções de choque parciais (efeito fotoelétrico, efeito Compton e produção de pares) sendo utilizado na análise diversos materiais (MEDHAT, 2015). O parâmetro de μ/ρ é obtido experimentalmente quando o coeficiente de atenuação linear, µ, é dividido pela densidade do material, ρ . Portanto, é mais interessante analisar μ/ρ porque esse parâmetro não irá mudar de acordo com o estado físico do material.

A energia do fóton de ~59,5 keV foi selecionada para fins de comparação entre os valores obtidos no XCOM. Esta energia corresponde à fonte do ²⁴¹Am como já descrito anteriormente (FERREIRA et al., 2018). Esta fonte é preferível à outras (¹³³Ba, ¹³⁷Cs, ⁶⁰Co) por vários motivos, dentre os quais, melhor custo-benefício por conta da meia vida da fonte, pico de energia bem definido na faixa dos efeitos fotoelétrico e Compton. Esta faixa de predominância de efeitos (fotoelétrico e Compton) gera valores de μ/ρ com maior discernimento entre si. Dependendo da espessura do material estudado (10-25 cm), do aparato experimental, da geometria

(tamanho e tipo de colimadores, distância fonte-detector), a fonte de ¹³⁷Cs muitas vezes torna-se a mais apropriada (PIRES, 2018; PIRES et al., 2014).

A partir da Tabela 4.3.2 é possível observar que a ordem crescente de valores de μ/ρ , em todas as camadas, segue a ordem Roça de Toco, Mata e Pasto. Nota-se também que os desvios padrão encontrados nas medidas dos principais óxidos do solo não se estendem aos valores de μ/ρ .

Tabela 4.3.2 - Valores médios do coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ) seguidos pelo desvio padrão (valores entre parênteses), obtidos no XCOM a partir dos dados de óxidos da WDXRF, para a energia específica de ~59,5 keV (²⁴¹Am), para a Mata (MA), Pasto (PA) e Roça de Toco (RT) para as quatro camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm).

		/		
		μ/ρ (cm² g⁻¹)		
Profundidade	0-5	5-10	10-20	20-40
(cm)				
MA	0,274	0,273	0,272	0,274
	(-)	(-)	(-)	(-)
PA	0,287	0,298	0,280	0,286
	(-)	(-)	(-)	(0,03)
RT	0,260	0,259	0,267	0,270
	(-)	(-)	(-)	(-)

O símbolo (-) significa que o desvio padrão foi inferior às casas decimais utilizadas para expressar os valores médios.

Na camada 5-10 cm, verifica-se que o Pasto apresentou um aumento de ~9% com relação a Mata para μ/p . Foi nesta camada que os óxidos Fe₂O₃ e TiO₂ tiveram suas maiores concentrações, influenciando diretamente nos valores de μ/p . Na mesma camada, observa-se que a Roça de Toco apresentou o menor valor, ~5% menor quando comparado com a Mata. É nesta camada também que este uso tem um aumento de ~25% do óxido SiO₂, mostrando que a concentração deste óxido também influencia diretamente nos valores de μ/p (PIRES, 2022; TECH et al., 2022a).

Na camada 10-20 cm, o Pasto apresentou o menor valor de µ/p quando comparado as demais camadas dentro do uso, ~3% maior quando comparado com a referência, porém ainda se mantém com o maior valor entre a Roça de Toco e a Mata. É nesta camada que este uso apresenta a maior concentração de SiO₂, cerca de 12% maior quando comparado com a Mata.

Já na camada 20-40 cm, a Roça de Toco tem um dos maiores valores de μ/ρ em relação as demais camadas dentro do uso, cerca de 1% menor quando comparado com a Mata, entretanto ainda continua sendo o menor valor nesta camada quando comparado com o Pasto e a Mata. É nesta camada que este uso apresenta o menor valor de concentração do SiO₂, ~5% maior que a Mata.

Para o parâmetro μ/ρ , é possível observar (Tabela 4.3.2) que os maiores valores em todas as camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm) foi para o uso Pasto. É neste uso que o óxido de Fe₂O₃ e TiO₂ (A_i (Fe₂O₃) =159,6896 g mol⁻¹ e A_i (TiO₂) = 79,8658 g mol⁻¹) apresenta maiores concentrações quando comparado com a Roça de Toco e a Mata. É possível observar também que os valores de μ/ρ do Pasto tende a diminuir quando há aumento no óxido SiO₂ (A_i(SiO₂)=60,0843). O óxido Al₂O₃ não apresentou grande influência nos valores de μ/ρ por conta de seu número atômico (A_i)(Al₂O₃)=101,9612) ser muito próximo do óxido SiO₂.

Nas camadas superficiais do solo (0-5 cm e 5-10 cm) é possível observar (Tabela 4.3.2) que os valores de μ/ρ da Roça de Toco apresentam diferenças significativas com a Mata. Entretanto, nas camadas mais inferiores do solo (10-20 cm e 20-40 cm) os valores apresentam maior proximidade, devido a diminuição da concentração do óxido SiO₂ e aumento dos óxidos Fe₂O₃ e TiO₂ (Tabela 4.3.3).

De acordo com os gráficos apresentados na Figura 4.3.1, a tendência de variação dos valores de μ/ρ segue a mesma tendência de variação dos óxidos Fe₂O₃ e TiO₂ somados. Os elementos Fe e Ti possuem os maiores números atômicos (26 e 22, respectivamente) quando comparados com os demais elementos que formam os principais óxidos encontrados no Neossolo. Sendo assim, os óxidos Fe₂O₃ e TiO₂ (A_i (Fe₂O₃) =159,6896 g mol⁻¹ e A_i (TiO₂) = 79,8658 g mol⁻¹) possuem maior influência nos valores de μ/ρ (Tabela 4.3.1 e Tabela 4.3.2), dado a dependência do parâmetro com a seção de choque do efeito fotoelétrico (KNOLL, 2010).

Figura 4.3.1 - Tendência de variação do coeficiente de atenuação de massa (μ/ρ) (linha preta) e do óxido Fe₂O₃+TiO₂ (linha azul), em função das camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT). As linhas verticais indicam o desvio padrão da média.



Fonte: A autora.

Tabela 4.3.3 - Valores da contribuição dos óxidos Fe₂O₃ e TiO₂ no coeficiente de atenuação de massa (μ /p) para cada camada analisada (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e Roça de Toco (RT).

	Fe2O3+11O2	2 (%)		
Profundidade (cm)	0-5	5-10	10-20	20-40
MA	4,01	4,16	3,98	4,56
	(0,25)	(0,39)	(0,15)	(0,21)
PA	4,88	7,57	4,44	5,67
	(0,68)	(0,53)	(0,26)	(0,91)
RT	1,33	1,16	2,61	3,65
	(0,11)	(0,68)	(1,21)	(0,16)

Os valores entre parênteses se referem ao desvio padrão das medidas.

Esta sensibilidade de µ/p com a composição química elementar do solo não é um resultado inédito. Mudahar et al. (1991) analisaram o µ/p total e parcial (de acordo com a influência dos efeitos dominantes) em função da composição química elementar do solo. Os resultados desses autores mostraram que solos mais argilosos, com maior concentração de Fe, apresentaram maiores valores de µ/p,

mostrando como esse parâmetro nuclear é sensível à composição química do solo, principalmente dos elementos mais pesados. Medhat (2012) estudou a dependência de μ/ρ com a composição química de algumas gemas (berílio, diamante, pérola, topázio, turmalina, zircônia, entre outras) com intuito de verificar como a cor dessas interfere na interação dos fótons. Como conclusão, esse autor verificou que μ/ρ se mostrou sensível à composição química dos materiais analisados para faixa de baixas energias (~0,80 MeV), mostrando que as gemas que possuíam elementos mais pesados (Mn, Cr, Fe, V, Zr) em sua composição apresentavam valores mais elevados de μ/ρ . Pires et al. (2019) investigaram a relação existente entre os minerais compostos de elementos mais pesados (Fe e Ti) com os valores de μ/ρ do solo. Foi confirmada a influência da concentração dos óxidos Fe₂O₃ e TiO₂ nos valores mais altos de μ/ρ , assim como a influência dos minerais que são compostos por esses óxidos.

Camargo et al. (2021) estudou o efeito do μ/ρ de cada óxido nos valores de μ/ρ total de cinco solos de diferentes texturas. Os elementos Fe e Ti foram os que mostraram maiores influências nos valores totais de μ/ρ na faixa de baixa energia dos fótons (1 keV - ~100 keV). Esses autores ainda mostraram que os solos que continham maiores conteúdos dos óxidos SiO₂ e Al₂O₃ apresentaram os menores valores de μ/ρ .

A Figura 4.3.2 traz o gráfico de μ/ρ em função do intervalo de energia dos fótons estudado. Nas regiões de baixas energias (10⁻³ MeV até ~0,60 MeV), os valores de μ/ρ são maiores, devido ao predomínio do efeito fotoelétrico cuja seção de choque é proporcional a Z⁴⁻⁵. Nas regiões de energia intermediária (~0,60 MeV até ~1 MeV), o espalhamento incoerente é o efeito predominante. Nesse efeito a seção choque apresenta dependência linear com Z de modo que μ/ρ torna-se praticamente constante. Na região de maiores energias (10 MeV até 100 GeV), o coeficiente de atenuação de massa passa a aumentar novamente, e isto se deve ao efeito produção de pares cuja seção de choque é proporcional a Z² (KAPLAN, 1997; KNOLL, 2010).

A energia dos fótons de ~59,5 keV, que corresponde a fonte radioativa de 241 Am, está compreendida na região de influência dos efeitos fotoelétrico e Compton e, portanto, é interessante analisar os valores de µ/p para esta energia específica, em virtude da dependência da seção de choque do efeito fotoelétrico com o número

atômico. Entretanto, não é possível identificar estas diferenças quando se analisa a variação do coeficiente de atenuação de massa em função do intervalo total de energia estudado, dado que não há distinção aparente entre as curvas.





Fonte: A autora.

Apesar da energia de ~59,5 keV estar compreendida na faixa onde o efeito fotoelétrico é dominante (1 keV – ~60 keV), podemos observar (Tabela 4.3.4) que o efeito Compton (60 keV – ~1 MeV) também possui uma influência expressiva no valor total de μ/ρ . Como nesta faixa de energia não há a ocorrência de produção de pares (1,02 MeV – 100 GeV), a porcentagem restante do valor total de μ/ρ deve-se ao espalhamento coerente.

Tabela 4.3.4 - Porcentagem da contribuição dos efeitos fotoelétrico e Compton no valor do coeficiente de atenuação de massa (μ/p) para o Pasto (PA), a Roça de Toco (RT) e a Mata (MA) para as quatro camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm).

Plantio/Camadas (cm)	Efeito Fotoelétrico (%)	Efeito Compton (%)
Mata (MA)		
0-5	33	56
5-10	33	57

10-20	33	57
20-40	33	56
Pasto (PA)		
0-5	36	54
5-10	38	52
10-20	34	55
20-40	36	54
Roça de Toco (RT)		
0-5	30	60
5-10	29	60
10-20	31	58
20-40	32	57

Seção de choque molecular

Como descrito na sessão *Programa XCOM*, de acordo com a Equação 4.2.1, σ_M depende da soma do número de fórmulas unitárias de cada molécula que compõe o solo e do peso atômico de cada elemento das moléculas que os constituem, ou seja, n_iA_i. A Tabela 4.3.5 traz os valores de σ_M para a energia específica de ~59,5 keV (²⁴¹Am).

Tabela 4.3.5 - Valores médios de σ_M , seguidos do desvio padrão, para a energia específica de ~59,5 keV (²⁴¹Am) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT) para as quatro camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm).

10, 10 20, 20 10 011	/•			
	σм	(barn/molécula)		
Profundidade	0-5	5-10	10-20	20-40
(cm)				
MA	5,34x10 ⁵	2,32x10⁵	8,77x10 ⁵	1,19x10 ⁶
	(6x10 ⁴)	(3x10 ⁵)	(8x10 ⁵)	(8x10 ⁵)
PA	5,75x10 ⁵	4,41x10⁵	7,00x10 ⁴	2,24x10⁵
	(5x10 ⁵)	(5x10 ⁵)	(1x10 ⁴)	(1x10 ⁵)
RT	1,34x10 ⁵	1,93x10⁵	1,09x10 ⁶	4,50x10 ⁴
	(7x10 ³)	(5x10 ⁴)	(6x10 ⁵)	(1x10 ⁴)

Os valores entre parênteses se referem ao desvio padrão das medidas.

Na camada 0-5 cm, o Pasto é o único uso do solo que apresenta diferença em relação a Mata e a Roça de Toco. Nas camadas 5-10 cm e 10-20 cm não se observa diferenças entre os diferentes usos do solo. Já na camada 20-40 cm, a Mata e os demais usos mostram diferenças de valores entre si, com a Roça de Toco tendo o menor valor, seguido da Mata e o Pasto.

A ordem de grandeza dos valores encontrados neste trabalho está de acordo com os valores encontrados em Tech et al. (2022b). Neste estudo, os autores investigaram os parâmetros de interação da radiação de 19 solos argilosos. Os valores de σ_M encontrados estão na ordem de grandeza de 10^5 e apresentam correlação negativa com o conteúdo do óxido Fe₂O₃ contido nos solos. Camargo et al. (2022) estudaram os parâmetros de interação da radiação de quatro solos com composições distintas dos óxidos majoritários (SiO₂, Al₂O₃, Fe₂O₃ e TiO₂). Os resultados de σ_M para a energia de ~59,5 keV indicaram uma forte correlação negativa com o conteúdo de argila presente nos solos (r=-0,859). Entretanto, no presente trabalho não foi possível observar correlações entre os valores de σ_M com as frações do solo ou, então, com o conteúdo dos óxidos majoritários das camadas do Neossolo.

O parâmetro o_M depende de todas as moléculas que compõe o solo. A cada repetição realizada o equipamento de WDXRF detecta moléculas em porcentagens menores que a própria precisão do equipamento, mas estas porcentagens são válidas de modo a fechar 100% da composição elementar do solo. Entretanto essas moléculas detectadas abaixo da precisão podem variar de uma repetição para outra, tanto na diversidade dos elementos que compõe as moléculas quanto na porcentagem dessas moléculas.

Tudo isso influencia na soma das fórmulas unitárias e do peso molecular das moléculas do solo, que possui relação direta na obtenção de σ_M (Figura 4.3.3a). Por isso as medidas de σ_M possuem altos desvios padrão e grande variabilidade entre uma repetição e outra, o que mostra a sensibilidade do parâmetro a pequenas mudanças na composição química do solo. Esta sensibilidade de n_iA_i pode ser verificada na Tabela 4.3.6 a seguir, que traz a variabilidade deste parâmetro para três repetições da camada 0-5 cm para a Mata.

Tabela 4.3.6 - Valores médios de n_iA_i (u_a) e desvio padrão (valor entre parênteses), para as três repetições da camada 0-5 cm do Neossolo para a área de referência (Mata – MA).

Repetição (n)	MA (1)	MA (2)	MA (3)
niAi (ua)	1150969	1363766	987080

De acordo com a Figura 4.3.3b podemos observar que o n_iA_i do óxido SiO₂ segue a mesma tendência dos valores de n_iA_i total. Isto evidência a influência do óxido SiO₂ nos valores de σ_M (Figura 4.3.3a). Isto é importante tendo em vista que o óxido SiO₂ é o mais abundante no solo estudado. Enquanto os valores de μ/ρ o óxido SiO₂ possui a tendência de diminuir os valores (PIRES, 2022), no caso de σ_M , SiO₂ possui a tendência de aumentar os valores (CAMARGO et al., 2022; TECH et al., 2022b).

Figura 4.3.3 - Tendência da seção de choque molecular (σ_M) (linha azul), n_iA_i total (linha preta) e n_iA_i SiO₂ (linha azul) em função das camadas do solo analisado para os diferentes usos (Mata – MA, Pasto – PA e Roça de Toco – RT).



Fonte: A autora.

Na simulação realizada na seção 2.5, a concentração máxima do TiO₂ foi a que apresentou o maior valor para o parâmetro (σ_M), contrariando os resultados encontrados. Entretanto, os valores da seção 2.5 foram obtidos a partir de simulações com valores ideais. Como pudemos observar, quando se trata de um

solo real, os valores de σ_M se mostram muito mais sensíveis aos diferentes componentes químicos do solo.

A Figura 4.3.4 traz a seção de choque molecular em função do intervalo de energia estudado. Podemos observar que σ_M apresenta comportamento de curva semelhante ao μ/ρ , pois σ_M possui dependência linear com o coeficiente de atenuação de massa (Equação 4.2.1). Este parâmetro também é o que possui maior distinção entre as curvas quando analisada sua dependência com a energia.

Figura 4.3.4 - Curvas da seção de choque molecular (σ_M) em função do intervalo de energia selecionado (1 keV – 100 MeV) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT) para as quatro camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm).



Fonte: A autora.

Como observado para μ/ρ , a curva em função da energia de σ_M mantém a mesma tendência para todo o intervalo de energia analisado. Portanto, os valores apresentados na Tabela 4.3.5, utilizando da energia de ~59,5 keV (²⁴¹Am), são interessantes para comparação do parâmetro σ_M entre as camadas e os usos analisados.

É válido ressaltar que apesar de σ_M depender diretamente dos valores de M (= $\sum n_i A_i$), e de M mostrar forte dependência com os valores de n_iA_i do óxido SiO₂, o parâmetro σ_M não mostrou nenhuma correlação com os valores de concentração do óxido SiO₂, ou com qualquer outro óxido mais abundante presente no solo. Isto mostra a complexidade de se trabalhar com este parâmetro quando óxidos isolados do solo são considerados.

Seção de choque atômica

Segundo a Equação 4.2.2, σ_A depende de σ_M e μ/ρ , possuindo dependência linear com este último parâmetro. A Tabela 4.3.7 traz os valores de σ_A para a energia específica de ~59,5 keV (²⁴¹Am). Em todas as camadas podemos observar que a Roça de Toco apresenta os menores valores de σ_A , seguido pela Mata e pelo Pasto.

Tabela 4.3.7 - Valores médios da seção de choque atômica (σ_A) e do desvio padrão, para a energia específica de ~59,5 keV (²⁴¹Am) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT) para as quatro camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm).

L X	σ	A (barn/átomo)		
Profundidade (cm)	0-5	5-10	10-20	20-40
MA	9,34	9,31	9,26	9,34
	(0,02)	(0,07)	(0,03)	(0,02)
PA	9,82	1,03	9,51	9,80
	(0,06)	(0,11)	(0,02)	(0,13)
RT	8,79	8,56	8,68	9,18
	(0,01)	(0,11)	(0,16)	(0,02)

Os valores entre parênteses se referem ao desvio padrão das medidas.

A partir da Figura 4.3.5 podemos observar que σ_A segue a mesma tendência do óxido Fe₂O₃ tanto para as camadas como para os métodos de uso do solo. Analisando os dados da Tabela 4.3.7 e Tabela 4.3.1 é verificado que a Roça de Toco possui os menores valores de σ_A , ao mesmo tempo que mostra um aumento no óxido SiO₂. Portanto, o aumento da quantidade de Silício no solo pode levar a uma diminuição no valor do parâmetro em questão (MEDHAT; PIRES, 2016).

Figura 4.3.5 - Tendência da seção de choque atômica (σ_A) (linha preta) e do óxido Fe₂O₃ (linha azul) em função das camadas de solo analisadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT).



Fonte: A autora.

Na camada 5-10 cm observa-se que o Pasto apresentou o maior valor de σ_A , ~11% maior quando comparado com a Mata. Como já explanado anteriormente, é nesta camada que o Pasto possui o maior valor de concentração do óxido Fe₂O₃, mostrando que a concentração deste influencia diretamente nos valores de σ_A . Ao mesmo tempo, pode-se observar que a Roça de Toco possui o menor valor para o σ_A , ~5% menor quando comparado com a Mata. Como já discutido anteriormente, é nesta camada que a Roça de Toco possui uma alta concentração do óxido SiO₂, mostrando que a alta concentração deste óxido também influencia nos valores de σ_A (MEDHAT; PIRES, 2016).

Na camada 10-20 cm, o Pasto tem um dos menores valores de σ_A quando comparado com as demais camadas, cerca de ~3% maior que a Mata; entretanto, continua tendo o maior valor do σ_A quando comparado com a Roça de Toco e a Mata. Este mesmo comportamento no Pasto foi observado quando discutido os

valores de μ/ρ para a mesma camada. Isso se deve ao aumento no conteúdo de SiO₂ que a Roça de Toco apresentou nesta camada (CAMARGO et al., 2022).

Na camada 20-40 cm, a Roça de Toco apresenta o maior valor de σ_A quando comparada aos demais camadas dentro do uso, ~2% menor quando comparado com a Mata. Isso se deve ao fato de que é nessa camada que o uso do solo apresenta a menor concentração de SiO₂ e também maior concentração de Fe₂O₃.

Os valores de σ_A encontrados neste trabalho estão em conformidade com os valores encontrados por Pires et al. (2019). No estudo desses autores, conduzido em Latossolo, os valores de σ_A foram maiores, pois o solo apresentou maiores conteúdos dos óxidos Fe₂O₃ e TiO₂. Os valores de σ_A apresentaram correlações positivas com estes mesmos óxidos (Fe₂O₃: r=0,87 p<0,05 e e TiO₂: r=0,88 p<0,05). Tal resultado evidencia a dependência de σ_A com os conteúdos de Fe₂O₃ e TiO₂. Medhat e Pires (2016) propuseram um sistema de classificação dos solos de acordo com a textura baseado nos valores de σ_A . De acordo com a simulação proposta por esses autores, os solos mais argilosos teriam os maiores valores de σ_A , dado que esses solos contêm porcentagens maiores do óxido Fe₂O₃; assim como solos mais arenosos possuem maiores porcentagens do óxido SiO₂ e menores valores de σ_A , mostrando que este parâmetro também é sensível à mudança na composição química elementar dos solos.

A partir da simulação da seção 2.5 observa-se que o maior valor de σ_A foi para a concentração máxima do Fe₂O₃, e que o menor foi para a concentração máxima do Al₂O₃. Nos resultados para o solo não simulado, nota-se que o aumento na concentração de SiO₂ é que influencia nos menores valores de σ_A . Isto porque o SiO₂ possui uma maior concentração no solo, quando comparado com o Al₂O₃ para todas as camadas e usos do solo.

A Figura 4.3.6 traz a seção de choque atômica em função do intervalo de energia estudado. É possível observar que σ_A apresenta curva semelhante ao μ/ρ , pois esse parâmetro possui dependência linear com o coeficiente de atenuação de massa (Equação 4.2.2). A seção de choque atômica também não possui distinção entre as curvas quando analisada sua dependência com a energia, assim como μ/ρ .

Figura 4.3.6 - Curvas da seção de choque atômica (σ_A) em função do intervalo de energia (1 keV – 100 MeV) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT) para as quatro camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm).



Fonte: A autora.

Assim como μ/ρ e σ_M , σ_A apresenta o mesmo comportamento em todo o intervalo de energia estudado. Entretanto, é na faixa de energias mais baixas (1 keV - ~60 keV) que os valores de σ_A apresentam os valores mais altos. Como σ_A apresenta comportamento de curva muito semelhante a μ/ρ , é possível concluir que os valores com maior distinção se dão na faixa de energias mais baixas por conta da dependência com a seção de choque do efeito fotoelétrico. Este efeito apresenta dependência com Z⁴⁻⁵, porém as diferenças entre os valores não são visíveis nos gráficos em função do intervalo de energia estudado.

As curvas de σ_A em função da energia também apresentam influência do efeito Compton e a produção de pares, estes têm dependência com Z e Z^2 , respectivamente. Estes efeitos são observados nas faixas de energia intermediária (~60 keV – 1 MeV) e altas energias (1,02 MeV – 100 GeV), respectivamente.

Seção de choque eletrônica

De acordo com a Equação 4.2.3, σ_E depende de µ/p de todos os elementos que compõe o solo. A Tabela 4.3.5.1 traz os valores de σ_E para a energia de ~59.5 keV (²⁴¹Am). Os valores apresentados para este solo estão de acordo com valores encontrados por Medhat et al. (2014), para solos com composição granulométrica mais arenosa, e de composição química elementar com maior porcentagem de SiO₂. No trabalho desses autores, os solos com maiores concentrações de SiO₂ e de textura mais próxima da arenosa possuíam os valores mais baixos de σ_E . Já os solos de textura mais argilosa, com maiores concentrações de Fe₂O₃ possuíam valores mais altos de σ_E .

Tabela 4.3.8 - Valores médios da seção de choque eletrônica (σ_E) e desvio padrão, para a energia específica de ~59.5 keV (²⁴¹Am), para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT) e para as quatro camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm).

	, • . •, . • =•, =•			
	σ	E (barn/elétron)		
Profundidade	0-5	5-10	10-20	20-40
(CIII)				
MA	0,929	0,928	0,925	0,930
	(-)	(0,01)	(-)	(-)
PA	0,974	1,010	0,946	0,973
	(-)	(0,01)	(-)	(0,01)
RT	0,878	0,868	0,896	0,915
	(-)	(0,01)	(0,02)	(-)

Os valores entre parênteses se referem ao desvio padrão das medidas. O símbolo (-) significa que o desvio padrão foi inferior às casas decimais utilizadas para expressar os valores médios.

Podemos observar (Tabela 4.3.8 e Figura 4.3.7) que os valores de σ_E seguem a mesma tendência do óxido Fe₂O₃, tanto nas camadas como nos usos do solo, assim como σ_A . Como na simulação realizada na seção 2.5, onde a concentração máxima do Fe₂O₃ apresentou o maior valor de σ_E , no solo não simulado (Neossolo), o resultado encontrado foi semelhante. Os menores valores, em todas as camadas, foram observados para a Roça de Toco seguido pela Mata e Pasto.

Figura 4.3.7 - Tendência de variação da seção de choque eletrônica (σ_E) (linha preta) e do óxido Fe₂O₃ (linha azul) em função das camadas analisadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT).



Fonte: A autora.

O mesmo comportamento observado para $\mu/\rho e \sigma_A$ na camada 5-10 cm, notase para σ_E . O sistema de uso Pasto possui o maior valor de σ_E (~9% maior comparado com a Mata) e a Roça de Toco o menor (~6% menor comparado com a Mata), sendo que estes valores são diretamente influenciados pela maior concentração de Fe₂O₃ e SiO₂ desta camada no solo, respectivamente.

Nas camadas 10-20 cm e 20-40 cm, observa-se o mesmo comportamento verificado para μ/ρ e σ_A . Estes resultados apresentados para o parâmetro σ_E mostram que mais esse parâmetro de interação é sensível às concentrações dos óxidos SiO₂ e Fe₂O₃. Os valores de σ_E encontrados neste estudo estão em conformidade com os valores encontrados em Medhat et al. (2014).

Medhat (2012) demonstrou que os valores de σ_E também aumentam quando se analisa a composição química elementar de outros materiais como gemas. Neste trabalho, a gema "Turmalina" ((Ca, K, Na)(Al, Fe, Li, Mg, Mn)₃(Al, Cr, Fe, V)₆), composta de vários elementos pesados como Fe, Mn, Cr e V apresentou os maiores valores de σ_E (1,47 b/elétron) quando comparada a outras gemas compostas de elementos de menores números atômicos. Pires et al. (2019) analisaram os parâmetros de interação da radiação em um Latossolo, mostrando resultados semelhantes ao presente estudo. De acordo com esses autores, o parâmetro σ_E teve correlação positiva com o óxido Fe₂O₃ (r=0.87, p<0,05). Desta forma, os valores de σ_E encontrados para o Neossolo estão em conformidade com os valores encontrados para o Latossolo. Entretanto, o Latossolo investigado por Pires et al. (2019) possuía um maior conteúdo de Fe₂O₃ e TiO₂ quando comparado ao Neossolo, por isso, os valores de σ_E para o Latossolo são maiores.

A Figura 4.3.8 traz as curvas de σ_E em função do intervalo de energia estudado. Este parâmetro, assim como as demais seções de choque estudadas, possui comportamento similar a μ/ρ apresentando dependência linear com σ_E (Equação 4.2.3) e não apresentando distinção entre as curvas quando analisadas no intervalo de energia selecionado.

Figura 4.3.8 - Curvas de variação da seção de choque eletrônica (σ_E) em função do intervalo de energia selecionado para estudo (1 keV – 100 MeV) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT) para as quatro camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm).



Fonte: A autora.

Assim como σ_M e σ_A , o parâmetro σ_E apresenta o mesmo comportamento ao longo de todo o intervalo de energia estudado. Da mesma forma que σ_A , o parâmetro σ_E apresenta os maiores valores na faixa de baixas energias (1 keV – ~60 keV). Entretanto, assim como σ_A , σ_E não apresenta diferença entre valores quando analisada a curva em função da energia. Mas, para a energia selecionada para comparação entre as camadas e usos, ~59,5 keV (²⁴¹ Am), os valores de σ_E apresentam boa distinção entre si. Esta distinção pode ser explicada pela predominância dos efeitos fotoelétrico e Compton, como já discutido anteriormente.

As seções de choque analisadas apresentaram resultados promissores para caracterizar o solo em função de variações na sua composição química. A seção de choque molecular apresentou resultados interessantes pela sensibilidade que este parâmetro apresenta. As curvas de σ_M apresentaram maiores distinções entre as camadas do Neossolo analisado e esse parâmetro mostrou dependência, mesmo

que indireta, com conteúdo de SiO₂. Já as seções de choque atômica e eletrônica complementaram os resultados acerca das variações das concentrações dos óxidos Fe₂O₃ e TiO₂.

Estes parâmetros trouxeram resultados mais aprofundados sobre a composição química do solo estudado. É possível propor um esquema de classificação do solo com base em sua composição química nos parâmetros de interação da radiação. Entretanto, como o solo é um sistema complexo é interessante analisar todos os parâmetros possíveis a fim de se ter uma melhor caracterização em função de sua composição química.

Número atômico efetivo

A Equação 4.2.4 traz o cálculo do parâmetro Z_{eff} que apresenta dependência com $\sigma_A e \sigma_E$. A Tabela 4.3.9 traz os valores de Z_{eff} para a energia específica de ~59,5 keV (²⁴¹Am). O número atômico efetivo está relacionado com a média de todos os números atômicos presentes na composição química do solo. Para o Neossolo estudado o número atômico variou de 8 (O) até 41 (Nb). Como esperado, os valores de Z_{eff} estão dentro deste intervalo de números atômicos (FERREIRA et al., 2018).

quallo camadas (0-5,	5-10, 10-20, 20-	40 cm).		
	o =	Zeff	40.00	00.40
Profundidade (cm)	0-5	5-10	10-20	20-40
MA	10,1	10,0	10,0	10,0
	(-)	(0,02)	(0,04)	(-)
PA	10,1	10,2	10,1	10,1
	(-)	(0,06)	(-)	(0,01)
RT	10,0	10,0	10,0	10,0
	(-)	(0,01)	(0,03)	(-)

Tabela 4.3.9 - Valores médios do número atômico efetivo (Z_{eff}) e desvio padrão para a energia específica de ~59,5 keV (241 Am) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT) para as quatro camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm).

Os valores entre parênteses se referem ao desvio padrão das medidas. O símbolo (-) significa que o desvio padrão foi inferior as casas decimais utilizadas para expressar os valores médios.

Entretanto, como Z_{eff} depende do inverso de σ_E , e este depende da abundância fracional f_i (Equação 4.2.3.3), os elementos que possuem maiores valores da abundância fracional são os elementos existentes em maior porcentagem na composição elementar do solo (Tabela 4.3.1). Como podemos observar na Tabela 4.3.10, os maiores valores de f_i foram encontrados para os elementos Si e Al.

Portanto, os valores de Z_{eff} ficam mais próximos dos valores dos números atômicos destes elementos (Z_{AI}=13; Z_{Si}=14).

Tabela 4.3.10 - Abundância fracional (f_i) dos principais óxidos detectados pelo método da fluorescência de raios X por comprimento de onda (WDXRF) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT) para as quatro camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm). Os demais óxidos correspondem a f<0,001 e não foram considerados.

		f _i SiO ₂		
Profundidade	0-5	5-10	10-20	20-40
(cm)				
MA	0,299	0,308	0,313	0,293
	(0,002)	(0,012)	(0,004)	(-)
PA	0,350	0,313	0,370	0,342
	(0,001)	(0,01)	(0,01)	(0,013)
RT	0,416	0,428	0,367	0,314
	(0,003)	(0,029)	(0,038)	(0,002)
		fi Al ₂ O ₃		
MA	0,159	0,152	0,148	0,168
	(0,002)	(0,012)	(0,004)	(-)
PA	0,094	0,128	0,082	0,108
	(0,007)	(0,010)	(0,002)	(0,013)
RT	0,048	0,037	0,096	0,149
	(0,003)	(0,029)	(0,038)	(0,001)
		fi Fe ₂ O ₃		
MA	0,015	0,015	0,014	0,014
	(-)	(0,001)	(-)	(0,001)
PA	0,026	0,038	0,023	0,029
	(-)	(0,003)	(-)	(0,004)
RT	0,005	0,003	0,008	0,012
	(-)	(0,002)	(,003)	(-)
		fi TiO2		
MA	0,010	0,011	0,011	0,014
	(0,001)	(-)	(-)	(0,001)
PA	0,008	0,012	0,006	0,008
	(-)	(-)	(-)	(-)
RT	0,003	0,002	0,008	0,011
	(-)	(0.002)	(0.004)	(-)

Os valores entre parênteses se referem ao desvio padrão das medidas. O símbolo (-) significa que o desvio padrão foi inferior as casas decimais utilizadas para expressar os valores médios.

O número atômico efetivo é conhecido por ser sensível a mudanças na composição química do solo (KUCUK et al., 2013). Na camada 0-5 cm, pode-se observar que o uso Roça de Toco apresenta diferença com os demais usos nesta camada, e apresenta o menor valor para Z_{eff}, cerca de ~0,5% menor quando comparado com a referência Mata. É nesta camada que a Roça de Toco tem uma das maiores concentrações do óxido SiO₂ e possui a menor concentração de Fe₂O₃.

Na camada 5-10 cm, o Pasto apresenta diferença com os demais usos, e o maior valor para Z_{eff}; ~1,5% maior quando comparado com a Mata, por possuir nesta camada a maior concentração de Fe₂O₃. Nas camadas 10-20 cm e 20-40 cm não foram observadas diferenças entre os diferentes usos.

Solos que possuem composição granulométrica mais argilosa e composição química com maior porcentagem de Fe₂O₃ são normalmente caracterizados por maiores valores de Z_{eff} (PIRES et al., 2019). Kumar et al. (1996) já haviam notado que minerais de argila com maiores quantidades de Fe₂O₃ em sua composição têm valores mais elevados de Z_{eff} em comparação aqueles com maiores teores de SiO₂. Isto demonstra a sensibilidade de Z_{eff} a mudanças na composição química de solos constituídos majoritariamente de elementos de alto número atômico.

Com base nessas informações, observa-se que Z_{eff} segue a mesma tendência de variação do óxido Fe₂O₃ (Figura 4.3.9a). Apenas na camada 20-40 cm na Roça de Toco, o valor de Z_{eff} não segue o mesmo padrão das demais camadas. Neste caso, o número atômico efetivo apresenta o mesmo valor da camada anterior (10-20 cm), enquanto os valores do óxido Fe₂O₃ continuam a crescer a medida que aumenta a profundidade.

Na simulação realizada na seção 2.5 com valores simulados da composição química do solo, já é possível observar que para os óxidos compostos de Si e Al não há diferença entre os valores de Z_{eff} , mesmo que seja com a concentração máxima dos óxidos SiO₂ e Al₂O₃. Isto porque esses elementos possuem números atômicos muito próximos (Z_{AI}=13 e Z_{Si}=14) e baixos quando comparados com os elementos Fe e Ti (Z_{Fe}=26 e Z_{Ti}=22) que compõe os óxidos majoritários.

Figura 4.3.9 - Tendência de variação do número atômico efetivo (Z_{eff}) (linha preta) e Fe₂O₃ (linha azul) em função das camadas analisadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm) e de Z_{eff} em função do intervalo de energia (1 keV – 100 MeV) para os usos do solo Mata (MA), Pasto (PA) e Roça de Toco (RT).





A Figura 4.3.9b traz as curvas de Z_{eff} em função do intervalo de energia estudado. Apesar de depender de σ_A e σ_E , que possuem comportamento de curva similar a μ/ρ , Z_{eff} apresenta um comportamento de curva bem diferente dos parâmetros vistos até o momento (μ/ρ , σ_M , σ_A e σ_E). Entretanto, o comportamento da

curva com a energia pode ser explicado a partir da predominância parcial dos principais efeitos (efeito fotoelétrico: 1 keV - ~60 keV, efeito Compton: ~60 keV – 1 MeV e produção de pares: 1,02 MeV – 100 GeV).

Como é possível observar, as curvas possuem melhor separação entre si, o que torna Z_{eff} um parâmetro interessante quando se analisa seu comportamento dentro do intervalo de energia selecionado nesse estudo. Assim como os parâmetros anteriores (μ/ρ , σ_M , σ_A e σ_E), Z_{eff} mostra o mesmo comportamento de curva para todo o intervalo analisado.

Densidade eletrônica

De acordo com a Equação 4.2.5, a densidade eletrônica depende de μ/ρ e Z_{eff}. A Tabela 4.3.11 traz os valores de N_{el} para a energia de ~59.5 keV (²⁴¹Am). Na camada 0-5 cm, a Mata e o Pasto não apresentaram diferenças entre si, já a Roça de Toco apresentou o maior valor. Na camada 5-10 cm, o mesmo comportamento pode ser observado. Nas camadas 10-20 cm e 20-40 cm, a Mata apresentou redução em relação as camadas mais superficiais, seguido pelo Pasto e pela Roça de Toco, que apresentou o maior valor para todas as camadas (Tabela 4.3.11).

N _{el} (x10 ²³ elétrons g ⁻¹)						
Profundidade (cm)	0-5	5-10	10-20	20-40		
MA	2,95	2,95	2,94	2,92		
	(-)	(0,01)	(0,01)	(-)		
PA	2,95	2,95	2,96	2,94		
	(-)	(0,02)	(-)	(-)		
RT	2,98	2,98	2,97	2,95		
	(-)	(-)	(0,02)	(-)		

Tabela 4.3.11 - Valores médios da densidade eletrônica (N_{el}) e do desvio padrão (valores entre parênteses) para a energia específica de ~59.5 keV (241 Am) para a Mata (MA), o Pasto (PA) e a Roça de Toco (RT) para as quatro camadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm).

O símbolo (-) significa que o desvio padrão foi inferior as casas decimais utilizadas para expressar os valores médios.

Podemos observar que N_{el} segue a mesma tendência do óxido SiO₂ e não do Fe₂O₃. Mesmo N_{el} dependendo diretamente de μ/ρ e Z_{eff} , que dependem diretamente do óxido de Ferro, os valores de N_{el} são mais influenciados pelo óxido com o menor número atômico (Figura 4.3.10a). Estes resultados estão em conformidade com aqueles encontrados na simulação realizada na seção 2.5.





Fonte: A autora.

O que pode explicar esta dependência é o fato de que N_{el} é inversamente proporcional a Z_{eff} (Equação 4.2.5), fazendo com que os parâmetros de maior valor de Z_{eff} possuam menores valores de N_{el} (CAMARGO et al., 2022). Isto é interessante, pois temos dois parâmetros com bastante distinção entre suas curvas
em função do intervalo de energia selecionado (Figura 4.3.10a), que são sensíveis a composição química do Neossolo estudado (Z_{eff} e N_{el}).

As mudanças no formato das curvas de N_{el} ocorrem em função das dependências das seções de choque com os efeitos correspondentes de acordo com o intervalo de energia (Figura 4.3.10b). Como já discutido para µ/p, os seus valores apresentam maiores diferenças na faixa de baixas energias (1 keV a ~60 keV). É possível observar que a Mata apresentou distinção somente em algumas energias entre as curvas em função do intervalo de energia estudado. Já o Pasto e principalmente a Roça de Toco mostraram distinção significativa entre as curvas com a energia. Esta maior distinção entre as curvas para a Roça de Toco se deve a influência do óxido SiO₂ em N_{el}. Pois como é possível observar pela Figura 4.3.10a, o SiO₂ é encontrado em maior abundância (Tabela 4.3.1) na Roça de Toco. Também podemos observar que o intervalo de diminuição do SiO₂ é maior entre as camadas da Roça de Toco variando de 67,33% (20-40 cm) a 91,73% (5-10 cm).

4.4 CONCLUSÕES

Os parâmetros de interação da radiação estudados mostraram-se sensíveis às mudanças na composição química do Neossolo estudado de acordo com uso do solo implementado. O sistema de uso Roça de Toco apresentou mudanças mais significativas nas primeiras camadas analisadas (0-5 cm e 5-10 cm) quando comparado com a Mata (referência).

Os óxidos Al₂O₃, Fe₂O₃ e TiO₂ tiveram suas concentrações diminuídas em menos de 50% da quantidade quando comparados com os valores da referência. Já o óxido SiO₂ teve sua concentração aumentada nas primeiras camadas do uso Roça de Toco. Entretanto, nas camadas mais profundas do solo (10-20 cm e 20-40 cm) os óxidos majoritários da Roça de Toco passaram a apresentar concentrações muito semelhantes à referência. O uso Pasto mostrou concentrações diminuídas, em todas as camadas analisadas, do óxido Al₂O₃ quando comparados com os valores da referência. Com relação aos demais óxidos majoritários esse uso apresentou valores semelhantes à referência.

Com base nos resultados de composição química do Neossolo, foi possível o cálculo de μ/ρ através do programa XCOM. Para este solo foi possível observar que a tendência de variação dos valores de μ/ρ estava relacionado com a tendência de

variação dos valores dos óxidos Fe₂O₃ mais TiO₂. A energia do fóton de ~59,5 keV (²⁴¹Am) se mostrou eficaz na análise de μ/ρ . Esta energia está compreendida na região de baixas energias baixas (1 keV – ~60 KeV) na qual os efeitos dominantes são o fotoelétrico e o Compton.

As seções de choque analisadas no presente trabalho (σ_M , $\sigma_A e \sigma_E$) mostraram diferentes resultados entre si. A seção de choque molecular mostrou dependência com o peso atômico e o número de fórmulas unitárias das moléculas do solo, principalmente do óxido SiO₂. Também, quando analisadas as curvas de σ_M em função da faixa de energia selecionada, este parâmetro mostrou boa distinção entre suas curvas. Já σ_A e σ_E mostraram uma tendência de variação de seus valores semelhante a variação do óxido Fe₂O₃. As curvas de variação desses parâmetros em função da energia não mostraram distinção entre si. O estudo das seções de choque mostrou a sensibilidade desses parâmetros em função das mudanças na composição química do solo.

O parâmetro Z_{eff} também se mostrou sensível às variações no conteúdo do óxido Fe₂O₃. Estes resultados encontrados para o Neossolo, corroboram com os resultados encontrados por diversos autores em estudos realizados com diferentes materiais. Já o parâmetro N_{el} mostrou tendência de variação de seus valores com a variação do conteúdo do óxido SiO₂. Este resultado está em conformidade com estudos recentes acerca de N_{el} e também com a simulação realizada no presente trabalho.

Os resultados encontrados mostraram que os usos do solo afetaram a composição química do Neossolo, principalmente com relação aos óxidos formadores de minerais secundários. O estudo dos parâmetros de interação da radiação se mostrou uma técnica interessante a fim de caracterizar um Neossolo sob diferentes usos antrópicos, oriundos de uma área de grande apelo ambiental. As mudanças na composição química do solo afetaram diretamente os parâmetros de interação da radiação. A análise detalhada de cada parâmetro mostrou que eles dependem da composição química do solo como um todo, possibilitando novas percepções acerca dos parâmetros de interação da radiação.

REFERÊNCIAS

ABREU, F. C. M. G. O. **DINÂMICA TERRITORIAL E POLÍTICAS AMBIENTAIS:** uma análise da relação entre crescimento da renda per capta e ocorrência de desmatamentos nos município da Área de Proteção Ambiental da Baixada Maranhense. Dissertação (Mestrado em Desenvolvimento Sociespacial) Universidade Estadual do Maranhão, São Luiz, 2013.

CAMARGO, M. A.; KODUM, K. S.; PIRES, L. F. How Does the Soil Chemical Composition Affect Its Cross-sections, Effective Atomic Number and Electron Density? Computer Simulation Analysis to Highlight the Radiation-soil Interaction Processes. **Brazilian Journal of Physics**, v. 52, p. 154, 2022.

CAMARGO, M. A.; KODUM K. S.; PIRES, L. F. How Does the Soil Chemical Composition Affect the Mass Attenuation Coefficient? A Study Using Computer Simulation to Understand the Radiation-Soil Interaction Processes. **Brazilian Journal of Physics**, p.1-9, 2021.

COSTA, J. C. et al. Soil mass attenuation coefficient: Analysis and evaluation. **Annals of Nuclear Energy,** v. 64, p. 206-211, 2014.

DEMIR, D.; TURSUCU, A. Measurement of the effective atomic number of Fe_xCr_{1-x} and Fe_xNi_x alloys using scattering of gamma rays. Journal of Alloys and Compounds, v. 581, p. 213-216, 2013.

EMBRAPA. **Manual de Métodos de Análise de Solo**. 2^a ed. Rio de Janeiro: Centro Nacional de Pesquisa de Solos, 1997.

FERREIRA, S. J. F. et al. Nutrientes na solução do solo em floresta de terra firme na Amazônia Central submetida à extração seletiva de madeira. **Acta Amazônica**, v. 36, p. 59-68, 2006.

FERREIRA, T. R. et al. Suface liming effects on soil radiation attenuation properties. **Journal of Soils and Sediments**, v. 18, p. 1641-1653, 2018.

FREITAS, I. C. Atributos de um Neossolo Quartzarênico da Pré-Amazônia sob Agroecossistemas de Produção Familiar. Tese (Doutorado em Agronomia) Universidade Federal de Goiás, Escola de Agronomia. Goiânia, 2013.

FREITAS, I. C. et al. Agroecossistemas de produção familiar da Amazônia e seus impactos nos atributos do solo. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 17, p. 3-11, 2013.

FREITAS, I. C. et al. Carbono no solo, acúmulo e qualidade da serapilheira em sistemas de produção familiar. **Floresta**, v. 46, p. 31-38, 2015.

HAN, I.; DEMIR, L. Mass attenuation coefficients, effective atomic numbers and electron densities of undoped and differently doped GaAs and InP crystals. **Annals of Nuclear Energy**, v. 36, p. 869-873, 2009.

HILLEL, D. Introduction to environmental soil physics. USA: Elsevier Science, 1998.

IBGE. Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística. Mapa de solos do Brasil: escala 1:5.000.000. 2001.

KAPLAN, I. Nuclear Physics. Boston: Addison-Wesley Publishing Company, 1997.

KODUM, K. S. Caracterização de solos da Caverna Abrigo da Areia Solta-GO-BR por técnica de espectroscopia e simulação de parâmetros de interação da **radiação**. Dissertação (Mestrado em Ciências – Área de concentração: Física) Universidade Estadual de Ponta Grossa, Ponta Grossa, 2021.

KUCUK, N.; TUMSAVAS, Z.; CAKIR, M. Determining photon energy absorption parameters for diferente soil samples. **Journal of Radiation Research**, v. 54, p. 578-586, 2013.

KUMAR, T. K.; REDDY, K. V.; VENKATARANAM, S. Effective atomic number studies in clay minerals for total photon interaction in the energy region 10 keV-10 MeV. **Radiation Physics and Chemistry**, v. 48, p. 707-710, 1996.

KURUDIREK, M. et al. A study of chemical composition and radiation attenuation properties in clinoptiolite-rich natural zeolite from Turkey. **Radiation Physics and Chemistry**, v. 79, p. 1120-1126, 2010.

KNOLL, G. F. Radiation and detection measurements. John Wiley & Sons Inc, Hoboken, 2010.

LESCH, I. F. Formação e Conservação dos Solos. 2^a ed. São Paulo: Oficina de Textos, 2010.

MEDHAT, M. E. Comprehensive study of photon attenuation through different construction matters by Monte Carlo Simulation. **Radiation Physcis and Chemstry**, v. 107, p. 66-74, 2015.

MEDHAT, M. E. Study of the mass attenuation coefficients and effective atomic numbers in some gemstones. **Journal of Radioanalytical Nuclear Chemestry**, v. 293, p. 555-564, 2012.

MEDHAT, M. E.; PIRES, L. F. Importance of photo atomic cross section for studying physical properties of different types of soil. **X-ray Spectrometry**, v. 45, p. 202-206, 2016.

MEDHAT, M. E.; PIRES, L. F.; ARTHUR, R. C. J. Analysis of photon interaction parameters as function of soil composition. **Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry**, v. 300, p. 1105-1112, 2014.

MUDAHAR, G. S.; MODI, S., S. M. Total and Partial Mass Attenuation Coefficients of Soils as a Function of Chemical Composition. **Applied Radiation and Isotopes**, v. 42, p. 13-18, 1991.

NEPSTAD, D. C.; MOREIRA, A.; ALENCAR, A. A. Floresta em Chamas: Origens, Impactos e Prevenção de Fogo na Amazônia. Programa Piloto para a Proteção das Florestas Tropicais do Brasil. Brasília, 1999.

PIRES, L. F. Soil analysis using nuclear techniques: A literature review of the gamma ray attenuation method. **Soil & Tillage Research**, v. 184, p. 216-234, 2018.

PIRES, L. F. et al. Radiation attenuation properties based on the quantification of soil components using the Rietveld Method. **Results in Physics**, v. 12, p. 2009-2011, 2019.

PIRES, L. F. Radiation shielding properties of weathered soils: Influence of the chemical composition and granulometric fractions. **Nuclear Engineering and Technology**, v. 54, p. 3470-3477, 2022.

PRANDEL, L. V. et al. Can the Granulometric Soil Fractions Attenuate the Radiaition Differently from the Whole Soil? **Brazilian Archives of Biology and Technology**, v. 64, p. 1-10, 2021.

REGELINK, I. C. et al. Linkages between aggregate formation, porosity and soil chemical properties. **Geoderma**, v. 248, p. 24-37, 2015.

RESENDE, M. et al. **Mineralogia de solos brasileiros: interpretação e aplicações**. 2ª edição, Lavras: UFLA, 2011.

SANTOS, H. D. et al. Sistema Brasileiro de Classificação dos Solos, 5ª ed. EMBRAPA, 2018.

SINGH, V. P.; MEDHAT, M. E.; BADIGER, N. M. Photon attenuation coefficients of thermoluminescent dosimetric material by Geant4 toolkit, XCOM program and experimental data: A comparison study. **Annals of Nuclear Energy**, v. 68, p. 96-100, 2014.

TECH, L. et al. Elemental and radiation attenuation parameter analyses to characterize a Cambisol from the Serra Dourada State Park, Brazil. **Environmental Earth Sciences**, v. 81, p. 63, 2022a.

TECH, L. et al. Radiation Attenuation Processes: the Role of Clay Porous Media. **Philippine Journal of Science**, v. 151, p. 823-832, 2022b.

VAN LIER, Q. J. **Física do Solo**. 1^a ed. Viçosa MG: Sociedade Brasileira de Ciência do Solo, 2010.

XUE, B. et al. Roles of soil organic carbon and iron oxides on aggregate formation and stability in two paddy soils. **Soil & Tillage Research**, v. 187, p. 161-171, 2019.

YANAGUISAWA, V. A. **Caracterização Mineralógica de um Neossolo Flúvico por Técnicas de Espectroscopia, Microscopia e Difração de Raios X**. Dissertação (Mestrado em Ciências –Área de Concentração: Física) Universidade Estadual de Ponta Grossa, Ponta Grossa, 2019.

YILMAZ, D.; GÜROL, A. Study of the relationship between different intensity ratios and effective atomic number in diluted uranium samples. **Radiation Physics and Chemistry**, v. 179, p. 109213, 2021.

5 CONCLUSÕES GERAIS

Neste trabalho de tese foram estudados dois solos pouco intemperizados caracterizados por meio de parâmetros de interação da radiação e composição de óxidos obtida pela técnica de fluorescência de raios X. O primeiro solo foi um Cambissolo, oriundo de uma unidade de conservação, teoricamente protegido de ações humanas, e o segundo, um Neossolo, oriundo da Amazônia Oriental, localizado em uma área que recebe muita visibilidade pela sua necessidade de conservação.

Os resultados do capítulo 3 permitiram a confirmação da primeira hipótese proposta. Os dados obtidos mostraram que mesmo quando os horizontes do Cambissolo não apresentaram diferenças significativas em termos da composição de óxidos (tanto para o método da EDXRF quanto para o da WDXRF), as curvas dos parâmetros Z_{eff} e N_{el}, por exemplo, mostraram diferenças significativas entre horizontes quando analisadas em função da energia. Tais resultados evidenciam que esses parâmetros são sensíveis a mudanças na composição química do solo, mesmo quando não há diferenças significativas em a sua composição química. Desta forma, foi possível obter parâmetros que permitiram mostrar diferenças entre os horizontes do solo mesmo quando dados como a composição de óxidos não apresentaram distinções.

Os resultados obtidos no capítulo 3 também possibilitaram verificar a veracidade da terceira hipótese proposta. De acordo com as análises da composição de óxidos por ambos os métodos estudados (EDXRF e WDXRF), foi possível mostrar que existem diferenças significativas nos parâmetros de interação da radiação entre os horizontes do solo. Esta diferença foi mais evidente quando analisados os conteúdos de óxidos obtidos pela WDXRF. Apesar do Z_{eff} não apresentar diferenças significativas entre seus horizontes, os demais parâmetros obtiveram diferenças visíveis entre seus parâmetros. Tais resultados mostram que quando é analisado o perfil do solo, os parâmetros de interação, para diferentes horizontes (camadas), não podem ser tratados como se tivessem o mesmo valor. Isto evidencia a necessidade de se determinar cada um desses parâmetros para as diferentes camadas quando os solos apresentam estratificação.

Ainda no capítulo 3, foi possível observar que os diferentes métodos de obtenção da composição de óxidos do solo afetaram as medidas dos parâmetros de interação da radiação, de acordo com a quinta hipótese. Por exemplo, para o coeficiente de atenuação de massa para o método da EDXRF, não foram observadas diferenças significativas entre os horizontes do Cambissolo. Entretanto, para o método da WDXRF foram observadas diferenças significativas entre a maioria dos horizontes. Tal resultado mostra que embora, ambas as técnicas se mostrem efetivas no cálculo da composição química do solo, o método da WDXRF se apresentou mais sensível na detecção de óxidos como, por exemplo, Fe₂O₃ e MgO, sendo o último detectado somente na WDXRF.

No capítulo 4, foi possível confirmar a segunda hipótese proposta neste trabalho. Com base na confirmação da quinta hipótese abordada no capítulo 3, utilizou-se o método da WDXRF para mostrar que os usos do solo Pasto e Roça de Toco apresentaram diferenças significativas em relação aos óxidos Al₂O₃, Fe₂O₃ e TiO₂. O Pasto apresentou valores mais elevados do Fe₂O₃ e diminuição no conteúdo do Al₂O₃, quando comparado com a referência. Já a Roça de Toco mostrou aumento no conteúdo de SiO₂ e diminuição nos conteúdos de Fe₂O₃ e TiO₂, nas camadas mais superficiais (0-5 cm e 5-10 cm), quando comparada com a referência. Estes resultados evidenciam que os usos do solo estudados afetam seus conteúdos de óxidos, principalmente aqueles relacionados aos minerais secundários do solo. No entanto, é importante frisar que esse estudo foi conduzido em um Neossolo e que, os mesmos usos do solo, podem apresentar resultados distintos quando conduzidos em outros tipos de solos. Os resultados aqui obtidos mostram a fragilidade de solos pouco desenvolvidos a mudanças e suas composições em virtude de diferentes usos.

Os parâmetros de interação da radiação se mostraram efetivos em caracterizar os solos através de suas composições de óxidos, de acordo com a quarta hipótese proposta no trabalho. Os resultados referentes ao Cambissolo poderão servir de referência para trabalhos futuros, quando solos de mesma classificação e próximos a região do parque ambiental, submetidos a ações antrópicas, forem investigados. Tal fato se torna mais evidente, porque os resultados do Neossolo mostraram que as ações humanas podem induzir mudanças na composição de óxidos do solo.

6 PERSPECTIVAS FUTURAS

Com base no que foi apresentado no trabalho de Tese é viável a proposição de alguns trabalhos futuros, a fim de aperfeiçoar a caracterização do solo a partir dos parâmetros de interação da radiação.

Os métodos de análise da composição de óxidos, a partir da fluorescência de raios X, e os métodos de obtenção do coeficiente de atenuação de massa, se mostraram eficazes na caracterização de solos jovens com e sem intervenção humana. No entanto, no presente trabalho de tese não foi possível uma análise mais aprofundada, entre todos os parâmetros analisados, do ponto de vista estatístico, a fim da análise de possíveis correlações entre esses parâmetros. A coleta de um maior número de amostras e em uma maior quantidade de pontos experimentais podem possibilitar o uso de ferramentas como a PCA (Análise de Componente Principal). Tais ferramentas podem permitir uma melhor análise de possíveis correlações entre as variáveis analisadas (composição química, textura, parâmetros de interação, etc.). Outra opção de análise de correlação, entre os parâmetros de interação da radiação e análises físicas e químicas do solo, é por meio da análise multivariada.

Outro estudo interessante e que não foi abordado nesse trabalho de tese, seria a análise de parâmetros estruturais (densidade, porosidade, macroporosidade, microporosidade, etc.) do solo. Por meio dos parâmetros estruturais poderia ser observado se eles podem causar alguma influência nos parâmetros de interação da radiação, principalmente tendo em vista a importância de propriedades do solo como a composição granulométrica na formação de agregados. Assim, seria possível mostrar que análises realizadas com amostras deformadas podem se correlacionar com amostras não deformadas.

ANEXO A – COMPOSIÇÃO QUÍMICA DE ÓXIDOS TOTAL (CAMBISSOLO E NEOSSOLO)

Em anexo seguem as Tabelas com o valor médio de todos os óxidos encontrados nos horizontes do Cambissolo e também das camadas do Neossolo estudados.

A Tabela 7.1.1 traz o valor médio com o desvio padrão entre parênteses para todos os óxidos encontrados nos horizontes do Cambissolo, para os dois métodos analisados (WDXRF e EDXRF).

Tabela A. 1 - Média de todos os óxidos, e respectivo desvio padrão, presentes nos horizontes (A, AB, Bi e C) do Cambissolo para os dois métodos de obtenção da composição química de óxidos dos solos (EDXRF e WDXRF).

		EDXRF		
Horizontes	А	AB	Bi	С
Óxidos (%)				
SiO ₂	52,279	49,636	48,079	49,908
	(0,671)	(0,560)	(0,733)	(0,269)
Al ₂ O ₃	39,663	41,783	43,197	41,861
	(0,107)	(0,831)	(0,984)	(0,404)
Fe ₂ O ₃	3,911	4,435	4,547	4,246
	(0,018)	(0,237)	(0,237)	(0,165)
K ₂ O	3,132	3,251	3,179	3,129
	(0,004)	(0,129)	(0,088)	(0,041)
SO₃	0,560	0,482	0,320	0,375
	(0,319)	(0,033)	(-)	(-)
TiO ₂	0,428	0,487	0,483	0,475
	(0,089)	(0,021)	(0,036)	(0,011)
BaO	0,179	0,192	0,181	0,175
	(0,009)	(0,014)	(0,022)	(0,023)
MnO	0,062	0,054	0,055	0,053
	(0,002)	(0,003)	(0,001)	(0,002)
ZrO ₂	0,021	0,022	0,021	0,021
	(-)	(0,001)	(0,001)	(0,001)
NiO	0,006	0,003	0,007	0,003
	(-)	(-)	(-)	(-)
Rb ₂ O	0,007	0,008	0,008	0,008
	(-)	(0,001)	(-)	(0,001)
CuO	0,007	0,007	0,008	0,008
	(-)	(-)	(-)	(-)
ZnO	0,006	0,007	0,006	0,006
	(-)	(-)	(-)	(-)
Y ₂ O ₃	0,002	0,002	0,001	0,002
	(-)	(-)	(-)	(-)
SrO	0,001	-	-	-
	(-)	(-)	(-)	(-)
V2O5	0,026	0,016	0,013	0,025
	(0,002)	(-)	(-)	(0,005)
Cr ₂ O ₃	0,014	0,017	0,016	0,015
	(-)	(0,002)	(0,002)	(0,001)
CaO	0,107	-	=	-
	(-)	(-)	(-)	(-)

Tm ₂ O ₃	-	0,030	0,029	0,039
i	(-)	(-)	(-)	(0,001)
MoO ₃	-	0,001	0,001	-
	(-)	(-)	(-)	(-)
		WDXRF		
SiO ₂	59,766	56,743	55,100	57,100
	(0,523)	(0,589)	(0,519)	(1,359)
Al ₂ O ₃	26,477	28,700	30,152	29,011
	(0,359)	(0,560)	(0,447)	(0,875)
Fe ₂ O ₃	5,918	6,652	7,071	6,478
	(0,099)	(0,137)	(0,138)	(0,875)
K ₂ O	4,400	4,573	4,627	4,468
<u> </u>	(0,089)	(0,055)	(0,072)	(0,093)
MgO	1,941	2,022	1,957	1,851
	(0,050)	(0,040)	(0,018)	(0,021)
SO₃	0,075	0,055	0,048	0,053
	(0,015)	(0,001)	(0,004)	(0,005)
1102	0,696	0,782	0,694	0,668
0-0	(0,111)	(0,067)	(0,023)	(0,097)
CaU	0,233	0,095	0,087	0,081
Ma	(0,018)	(0,026)	(0,019)	(0,008)
IVINO	0,095	0,084	0,069	0,079
	(0,015)	(0,003)	(0,004)	(0,008)
2102	(0,002)	(0.002)	(0.004)	(0,008)
NiO	0.027	0.027	0028	0.026
	(0,02)	(0.001)	(0.001)	(0,020
Rh ₂ O	0.017	0.017	0.016	0.015
11020	(0,001)	(0.001)	(0.002)	(0,002)
CuO	0,006	-	0.017	-
	(-)	(-)	(-)	(-)
ZnO	0.015	0.016	0.010	0.009
	(0.003)	(0.002)	(-)	(-)
Y ₂ O ₃	0,001	0,004	0,003	0.003
	(-)	(-)	(-)	(-)
SrO	0,001	-	-	-
	(-)	(-)	(-)	(-)
P ₂ O ₅	0,095	0,064	0,052	0,057
	(0,013)	(0,001)	(0,006)	(0,006)
Na ₂ O	0,220	0,220	0,173	0,209
	(0,072)	(0,033)	(0,021)	(0,035)
C02O3	-	0,006	-	0,005
	(-)	(-)	(-)	(-)
Ga ₂ O ₃	-	-	-	0,004
	(-)	(-)	(-)	(-)
PdO	-	-	-	0,023
	(-)	(-)	(-)	(-)

Os valores seguidos (-) de apresentaram desvio padrão menores do que a precisão das medidas.

A seguir, a Tabela 7.1.2 traz o valor médio de todos os óxidos encontrados pelo método da WDXRF, para os dois plantios (Pasto e Roça de Toco) e a área de referência (Mata) do Neossolo estudado, para as quatro camadas analisadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm).

Plantio (cm)	MA 0-5	MA 5-10	MA 10-20	MA 20-40	PA 0-5	PA 5-10	PA 10-20	PA 20-40	RT 0-5	RT 5-10	RT 10-20	RT 20-40
Óxidos (%)												
SiO ₂	64,000	66,100	67,034	62,767	75,067	66,691	79,267	73,267	89,000	91,734	78,634	67,334
	(0,435)	(2,800)	(0,951)	(0,112)	(1,582)	(2,695)	(0,585)	(3,450)	(0,608)	(6,628)	(8,803)	(0,503)
Al ₂ O ₃	30,067	28,767	28,134	31,867	17,800	24,234	15,634	20,467	9,091	7,067	18,667	28,267
	(0,513)	(2,328)	(0,763)	(0,057)	(1,493)	(2,013)	(0,493)	(2,600)	(0,679)	(5,535)	(7,351)	(0,0305)
Fe ₂ O ₃	2,267	2,234	2,112	2,245	3,788	5,556	3,291	4,200	0,743	0,500	1,278	1,756
	(0,061)	(0,272)	(0,119)	(0,127)	(0,133)	(0,451)	(0,117)	(0,650)	(0,055)	(0,365)	(0,544)	(0,025)
TiO ₂	1,744	1,934	1,878	2,312	1,434	2,022	1,144	1,467	0,591	0,656	1,345	1,900
	(0,196)	(0,124)	(0,037)	(0,092)	(0,150)	(0,087)	(0,148)	(0,262)	(0,062)	(0,318)	(0,667)	(0,144)
SO3	0,589	0,244	0,167	0,144	0,533	0,34	0,189	0,100	0,090	0,100	0,134	0,095
	(0,037)	(0,006)	(0,006)	(0,015)	(0,003)	(0,023)	(0,027)	(0,018)	(0,007)	(0,055)	(0,053)	(0,020)
P_2O_5	0,456	0,189	0,144	0,112	0,344	0,256	0,144	0,112	0,092	0,067	0,100	0,112
	(0,028)	(0,015)	(0,008)	(0,018)	(0,023)	(0,045)	(0,013)	(0,021)	(0,015)	(0,027)	(0,024)	(0,004)
K ₂ O	0,256	0,212	0,178	0,167	0,191	0,178	0,100	0,090	0,123	0,122	0,144	0,156
	(0,009)	(0,029)	(0,015)	(0,030)	(0,059)	(0,035)	(0,007)	(0,010)	(0,017)	(-)	(0,047)	(0,006)
CaO	0,234	0,078	0,066	-	0,389	0,078	0,050	0,122	0,112	0,079	-	0,066
	(0,017)	(-)	(-)	(-)	(0,039)	(0,021)	(-)	(-)	(0,015)	(-)	(-)	(0,009)
MgO	0,261	0,188	0,266	0,252	0,262	0,196	0,134	0,146	0,119	0,153	0,138	0,226
	(0,030)	(0,064)	(0,031)	(0,019)	(0,060)	(0,042)	(0,028)	(0,028)	(0,016)	(-)	(0,057)	(0,015)
ZrO ₂	0,070	0,078	0,069	0,084	0,136	0,121	0,073	0,090	0,040	0,031	0,065	0,089
	(0,004)	(0,006)	(0,004)	(0,001)	(0,002)	(0,023)	(0,006)	(0,013)	(0,002)	(0,015)	(0,025)	(0,002)
Br	0,021	-	0,076	-	0,010	-	-	0,008	-	-	-	-
	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Nb ₂ O ₅	0,011	-	-	0,001	-	0,010	-	-	-	-	-	-
	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
SrO	0,028	0,082	-	0,001	0,010	-	-	-	-	-	-	-
	(0,033)	(-)	(-)	(0,009)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
CI	0,069	0,042	-	-	0,049	-	-	-	-	-	-	-
	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
MnO	0,056	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Y_2O_3	-	-	0,006	0,004	0,008	-	-	-	-	-	0,029	-
	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
Nb ₂ O ₅	-	-	0,057	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)

Tabela A. 2 - Média dos óxidos obtidos pelo método da WDXRF, encontrados no Neossolo para os dois plantios, Pasto e Roça de Toco, e a referência Mata, para as quatro camadas analisadas (0-5, 5-10, 10-20, 20-40 cm).

ZnO	-	-	-	-	0,122	-	-	-	-	-	-	-
	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
NiO	-	-	-	-	-	-	-	0,02	-	-	-	-
	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
				. ~		. ~						

Os valores seguidos (-) de apresentaram desvio padrão menores do que a precisão das medidas.