

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE FÍSICA
CURSO DE BACHARELADO EM FÍSICA MÉDICA

TOMÁS FERREIRA DIAS COSTA DE VASCONCELOS

SIMULAÇÕES DIDÁTICAS DE FÍSICA HADRÔNICA USANDO O TOPAS MC

Rio de Janeiro

2024

TOMÁS FERREIRA DIAS COSTA DE VASCONCELOS

SIMULAÇÕES DIDÁTICAS DE FÍSICA HADRÔNICA USANDO O TOPAS MC

Trabalho de conclusão de curso de graduação
apresentado ao Instituto de Física da Univer-
sidade Federal do Rio de Janeiro como parte
dos requisitos para obtenção do grau de Ba-
charel em Física Médica.

Orientadora: Dr^a Simone Coutinho Cardoso
Co-orientador: Dr Luiz Antonio Ribeiro da Rosa

Rio de Janeiro
2024

CIP - Catalogação na Publicação

V331s Vasconcelos, Tomás Ferreira Dias Costa de
SIMULAÇÕES DIDÁTICAS DE FÍSICA HADRÔNICA USANDO O
TOPAS MC / Tomás Ferreira Dias Costa de
Vasconcelos. -- Rio de Janeiro, 2024.
55 f.

Orientadora: Simone Coutinho Cardoso.
Coorientador: Luiz Antonio Ribeiro da Rosa.
Trabalho de conclusão de curso (graduação) -
Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto
de Física, Bacharel em Física Médica, 2024.

1. Física Médica. 2. Física das Radiações. 3.
Ensino de Física. 4. Monte Carlo. 5. TOPAS MC. I.
Cardoso, Simone Coutinho, orient. II. Rosa, Luiz
Antonio Ribeiro da, coorient. III. Título.

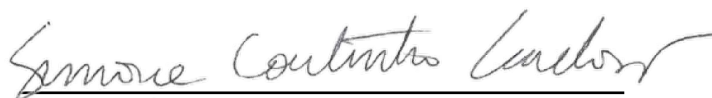
TOMÁS FERREIRA DIAS COSTA DE VASCONCELOS

SIMULAÇÕES DIDÁTICAS DE FÍSICA HADRÔNICA USANDO O TOPAS MC

Trabalho de conclusão de curso de graduação
apresentado ao Instituto de Física da Uni-
versidade Federal do Rio de Janeiro como
parte dos requisitos para obtenção do grau
de Bacharel em Física Médica.

Aprovado em 18 de Dezembro de 2024

BANCA EXAMINADORA:



Dr^a Simone Coutinho Cardoso (Orientadora)
Instituto de Física (UFRJ)



Dr Bruno Coelho César Mota
Instituto de Física (UFRJ)



Dr^a Wania Wolff
Instituto de Física (UFRJ)

Dedico este trabalho a todos que buscam
ser melhores hoje do que ontem.

AGRADECIMENTOS

Agradeço, em primeiro lugar, a Deus, que transforma todo o sofrimento em graça.

Agradeço à minha mãe Cristina, meu irmão Tiago e toda a minha família por sempre me apoiarem em tudo que faço de bom, com carinho especial à minha avó Lucília. Com ela, duas taças de vinho e um dia chuvoso fazem nossos almoços durarem uma vida inteira, e mais.

Agradeço a todos os monges, professores, coordenadores e inspetores do Colégio de São Bento que passaram pela minha vida, porque minha vida não vai passar um dia sequer sem o que eles fizeram por mim. Agradeço também a todos os meus amigos que se formaram comigo, porque a distância pouco importa aos que têm o coração nas mesmas coisas. E pode até parecer estranho, mas eu agradeço àquelas benditas escadas, que me visitaram em sonhos várias noites.

Agradeço a todos os meus professores da UFRJ, do IEN e do IRD, porque já fui mau aluno, mas nunca tive um único mau professor. Vai ver, não guardo rancores ou sou sortudo mesmo. A critério de esclarecimento, peço desculpas pelos cochilos que dei em aula; garanto que não foram por desinteresse.

Agradeço a todos os meus preceptores de estágio, principalmente os de Radioterapia, por me mostrarem a beleza da profissão escondida no meio do bom, do ruim e do melhor. Todos os pastéis e joelhos de almoço e jantar valeram a pena.

Agradeço a todos os colegas com quem consegui formar laços de amizade nesses anos de faculdade, apesar de ser quieto e introvertido, principalmente meu colega formando Lucas Braga. E agradeço de coração àquelas que tive o prazer de ver nas minhas monitorias de Imagens por Ressonância Magnética e Física das Radiações I e II. Sem dúvida alguma, ensinar é a melhor forma de aprender.

Por último, mas nem de longe menos importante, agradeço à minha orientadora Simone. Parecia que ela sempre acreditava mais em mim do que eu mesmo, me obrigando a ir além. Sem ela, nada disso teria sido possível nesse um ano e pouco.

*Longe do estéril turbilhão da rua,
Beneditino, escreve! No aconchego
Do claustro, na paciência e no sossego,
Trabalha, e teima, e lima, e sofre, e sua!*

A um poeta, Olavo Bilac

RESUMO

Física das Radiações é o tema mais importante abordado em cursos de graduação em Física Médica. Bancas de concursos de residência na área tendem a cobrar cada vez mais esse tema, favorecendo bacharéis em Física Médica em relação a bacharéis ou licenciados em Física. Assim, se mostra necessária a implementação de ferramentas práticas que estimulem o aprendizado dos estudantes. A fim de contribuir com o ensino de Física das Radiações nas universidades, simulações de Monte Carlo podem ser apresentadas como forma de estudo dinâmico. O TOPAS MC é um código de Monte Carlo gratuito que pode ser usado com pouco ou nenhum conhecimento de linguagens de programação. Por ser capaz de atender à maioria das necessidades dos estudantes, sem ser excessivamente complexo, o TOPAS tem se mostrado uma ferramenta pertinente ao ambiente acadêmico. Este trabalho visa fornecer uma base teórica de Física das Radiações e apresentar simulações didáticas de física de partículas carregadas pesadas com o TOPAS. As simulações propostas tiveram o objetivo de verificar a influência da presença de uma fina camada de osso no alcance de prótons em água, e, em seguida, de mostrar a relação de alcance entre partículas de massas diferentes para uma mesma energia cinética relativa. Um teste Z aplicado nos resultados da primeira fase de simulações indica que a espessura da camada de osso escolhida diminuiu o alcance das partículas em até 3,7 desvios padrões para a resolução de voxel usada. O mesmo teste aplicado na segunda fase de simulações mostra que foi possível prever, a partir do alcance de um feixe de prótons, o alcance de partículas de massa maior em até 2,6 desvios padrões para a resolução de voxel usada.

Palavras-chave: Física Médica. Física das Radiações. Ensino de Física. Monte Carlo. TOPAS MC.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Esquema para definição de seção de choque. Fonte: O autor.	15
Figura 2 – Curva de atenuação exponencial de intensidade (número de partículas) característica de radiação indiretamente ionizante. Fonte: O autor. . .	17
Figura 3 – Regiões de predominância de cada uma das três interações mais importantes que fótons realizam. As curvas indicam fronteiras onde as seções de choque para os respectivos efeitos são iguais. σ_{ph} , σ_C e σ_{pp} são as seções de choque para os efeitos fotoelétrico, Compton e produção de pares, respectivamente. Fonte: Figura traduzida e adaptada de ANDREO et al. (2017).	18
Figura 4 – Esquema de ionização de um elétron da camada K, onde $\hbar\omega$ é a energia do fóton incidente, I é o módulo da energia de ligação do elétron na camada e E_c é a energia cinética do fotoelétron. Fonte: O autor.	18
Figura 5 – Seção de choque total do efeito fotoelétrico para o Ouro. Podemos ver os picos condizentes com as energias de ionização das camadas eletrônicas K, L e M. Fonte: Figura traduzida e adaptada de ANDREO et al. (2017). . .	19
Figura 6 – Esquema de ionização de um elétron da camada K, onde $\hbar\omega$ é a energia do fóton incidente, $\hbar\omega'$ é a energia do fóton espalhado, I é o módulo da energia de ligação do elétron na camada e E_c é a energia cinética do elétron ejetado. Fonte: O autor.	20
Figura 7 – Diagrama de conservação de momento, onde $\hbar\omega/c$ é o momento linear do fóton incidente, $\hbar\omega'/c$ é o momento linear do fóton espalhado a θ graus e $\vec{p}$ é o momento linear do elétron ejetado a ϕ graus. Fonte: O autor, inspirada em uma figura de ANDREO et al. (2017).	20
Figura 8 – Seções de choque para o efeito Compton, onde as curvas representadas por $\sigma_{c,KN}$ e $\sigma_{c,KN}^{tr}$ são calculadas pela fórmula de Klein-Nishina e pela fórmula de transferência de energia. Fonte: Figura traduzida e adaptada de ANDREO et al. (2017).	21
Figura 9 – Esquema de energia representativo da interpretação de Dirac para a produção de pares. Fonte: O autor.	22
Figura 10 – Seção de choque total para nêutrons em H, N, O e C. Fonte: Figura traduzida e adaptada de ANDREO et al. (2017).	24
Figura 11 – Interações mais prováveis para cada tipo de nêutron. Fonte: Figura traduzida e inspirada em ANDREO et al. (2017).	24
Figura 12 – Curva característica da fluência de elétrons primários. A simulação foi feita no TOPAS usando elétrons de 25 MeV em água. Fonte: O autor.	26

Figura 13 – Curvas características da fluência de prótons primários. As simulações foram feitas no TOPAS usando prótons de 5 MeV (curva preta) e 100 MeV (curva cinza) em água com o mesmo número de histórias e configurações semelhantes de geometria. A perda de fluência na curva de 100 MeV indica que os prótons primários realizaram reações nucleares. As curvas foram normalizadas para a mesma profundidade de alcance. Fonte: O autor.	27
Figura 14 – As quatro interações principais para partículas carregadas: (a) colisão <i>hard</i> , (b) colisão <i>soft</i> , (c) emissão de raios X de freamento e (d) espalhamento elástico. Na figura, b é o parâmetro de impacto e a é o raio atômico. Além desses três, podemos imaginar um quarto parâmetro de impacto, no qual a partícula colide com o núcleo. Fonte: Figura traduzida e adaptada de ANDREO et al. (2017).	28
Figura 15 – Partícula negativamente carregada com velocidade v e aceleração a interagindo com parâmetro de impacto muito menor que o raio atômico. Fonte: O autor.	30
Figura 16 – Gráfico de intensidade por energia do fóton emitido. Podemos ver que a energia com menor intensidade de emissão é a energia máxima. Por exemplo, um feixe de radioterapia de 6 MV possui fótons de, no máximo, 6 MeV e energia média de, aproximadamente, 4 MeV. Fonte: O autor, inspirada em uma figura de ATTIX (1986).	31
Figura 17 – Curva de deposição de dose em profundidade por um feixe de íons Carbono. A cauda de deposição de dose após o ponto de dose máxima (pico de Bragg) é causada por partículas produzidas em reações nucleares. Fonte: O autor.	32
Figura 18 – Diagrama simplificado de energia para a emissão de raios X característicos. A energia do fóton é determinada pela diferença entre as energias inicial e final do elétron; note que a energia final é menor do que a inicial. Fonte: O autor.	34
Figura 19 – Diagrama simplificado de energia para o efeito Auger. A Figura mostra um exemplo em que ambos os elétrons pertencem a L2, mas outras combinações de elétrons são possíveis. Fonte: O autor.	35
Figura 20 – Esquema simplificado de um poço de energia característico de núcleos. O raio gama emitido tem energia igual à diferença de energia do próton ou nêutron antes e depois do relaxamento. Fonte: O autor.	36
Figura 21 – Exemplo gráfico de simulação usando o método de Monte Carlo para a determinação de π . Quanto maior a quantidade de pontos sorteados, melhor será a estatística. Fonte: O autor.	38
Figura 22 – Módulos de física usados para validação. Fonte: O autor.	43

Figura 23 – Geometrias do fantoma e do dosímetro usadas nas simulações. Fonte: O autor.	44
Figura 24 – Definições de geometrias de osso (<i>Skull</i>) e água (<i>Brain</i>) para o fantoma heterogêneo. A irradiação do feixe se deu ao longo do eixo z no TOPAS. Para que o fantoma se torne homogêneo, basta descomentar a linha 9 e comentar a linha 10 do código. Fonte: O autor.	45
Figura 25 – Definição de parâmetros do feixe. Note que o feixe precisa ser deslocado apenas pelo tamanho HLZ do fantoma, dado que todas as estruturas do TOPAS são criadas na origem. Fonte: O autor.	46
Figura 26 – Curvas de PDP para íons Hélio de 800 MeV. As curvas foram normalizadas para 100% na dose máxima. Fonte: O autor.	47
Figura 27 – Comparação de alcances obtidos para ambas as físicas com valores da tabela ASTAR (NIST...,). Fonte: O autor.	47
Figura 28 – Energia depositada por feixes de íons Carbono de 195 MeV/u, 200 MeV/u, 270 MeV/u e 400 MeV/u. Fonte: O autor.	48
Figura 29 – Curvas de PDP para prótons de 100 MeV nos dois fantomas. A linha vertical indica a interface osso-água para a curva do fantoma heterogêneo. As curvas foram normalizadas para 100 % na dose máxima. Fonte: O autor.	49
Figura 30 – Curvas de PDP para prótons, dêutetrans, íons Hélio e íons Carbono, todos com 150 MeV/u. As curvas foram normalizadas para 100% na dose máxima. Fonte: O autor.	50

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	– Nomes dados a nêutrons por faixa energética.	24
Tabela 2	– Alcances obtidos para as energias nos dois fantasmas comparados com o alcance da tabela PSTAR.	50
Tabela 3	– Alcances obtidos nas simulações, seus alcances esperados em relação ao alcance dos prótons e, para prótons e íons Hélio, alcances tabelados. . .	51

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	15
2.1	SEÇÃO DE CHOQUE E PROBABILIDADE	15
2.2	INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO COM A MATÉRIA	16
2.2.1	Radiação indiretamente ionizante	16
2.2.1.1	Fótons	17
2.2.1.1.1	Efeito fotoelétrico	18
2.2.1.1.2	Efeito Compton	20
2.2.1.1.3	Produção de pares	21
2.2.1.1.4	Espalhamento Rayleigh	23
2.2.1.1.5	Efeito fotonuclear	23
2.2.1.2	Nêutrons	23
2.2.1.2.1	Espalhamento elástico	25
2.2.1.2.2	Captura	25
2.2.2	Radiação diretamente ionizante	26
2.2.2.1	Colisões inelásticas e <i>stopping power</i> eletrônico	27
2.2.2.2	Espalhamento elástico	29
2.2.2.3	Raios X <i>Bremsstrahlung</i> e <i>stopping power</i> nuclear	29
2.2.2.4	Colisões nucleares	31
2.2.2.5	Alcance	32
2.2.3	A matéria após a interação	34
2.2.3.1	Fotodesexcitação	34
2.2.3.2	Efeito Auger	35
2.2.3.3	Eventos nucleares	36
2.2.3.4	Aniquilação de pares	37
2.3	MONTE CARLO	37
2.3.1	Distribuição da média de variáveis aleatórias	38
2.3.2	Movimento Browniano	39
2.3.3	TOPAS MC	40
2.3.3.1	Biblioteca de seções de choque do TOPAS	40
2.3.3.2	Feixe	40
2.3.3.3	Geometria	41
2.3.3.4	Aquisição ou <i>scoring</i>	41
3	MATERIAIS E MÉTODOS	43

3.1	TOPAS MC	43
3.2	VALIDAÇÃO DO ALCANCE DE ÍONS HÉLIO EM ÁGUA	43
3.3	VALIDAÇÃO DO ALCANCE DE ÍONS CARBONO EM ÁGUA	44
3.4	SIMULAÇÕES DIDÁTICAS	45
3.4.1	Influência da heterogeneidade osso-água no alcance de feixes monoenergéticos de prótons	45
3.4.2	Alcance esperado de partículas carregadas pesadas	46
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	47
4.1	VALIDAÇÃO DO ALCANCE DE ÍONS HÉLIO EM ÁGUA	47
4.2	VALIDAÇÃO DO ALCANCE DE ÍONS CARBONO EM ÁGUA	48
4.3	SIMULAÇÕES DIDÁTICAS	49
4.3.1	Influência da heterogeneidade osso-água no alcance de feixes monoenergéticos de prótons	49
4.3.2	Alcance esperado de partículas carregadas pesadas	50
5	CONCLUSÃO	52
6	PERSPECTIVAS FUTURAS	53
	REFERÊNCIAS	54

1 INTRODUÇÃO

A Física Médica é uma área que vem se desenvolvendo bastante no Brasil nos últimos anos. Isso pode ser atribuído, entre outros fatores, à necessidade de suprir a demanda crescente por métodos diagnósticos e terapêuticos usando radiação ionizante. Por exemplo, a análise feita por Rosa e colaboradores (ROSA et al., 2023) indica que, até 2030, o número de físicos médicos da Radioterapia deveria subir de 533 para 1060, para dar conta do aumento esperado do número de casos de câncer. Isso mostra a importância de se incentivar o ensino de Física Médica nas universidades.

Na UFRJ, o que diferencia, em princípio, um bacharelado em Física Médica de um bacharelado em Física pode ser resumido em três aspectos principais: as matérias da área da saúde, os estágios curriculares e as matérias de Física das Radiações. As matérias da saúde, como Anatomia, Biologia celular, Fisiologia e Radiobiologia, ficam espalhadas pela grade, enquanto que os estágios em Radiologia, Medicina Nuclear e Radioterapia se concentram nos períodos finais.

Física das Radiações inaugura o ciclo profissional como uma continuação de Física Moderna e serve de acompanhamento concomitante à teoria abordada em Conceitos de Mecânica Quântica. A ementa conta com um aprofundamento em seção de choque, interação da radiação com a matéria, detetores de radiação e termina com grandezas dosimétricas e teoria de cavidades. Contudo, é preciso que o ensino dessa disciplina seja realizado em atenção à natureza prática da profissão, de modo que os alunos consigam aproveitar ao máximo os estágios observacionais, que servirão de base para a escolha profissional.

Neto e colaboradores (NETO et al., 2023) forneceram uma linha de base para o uso do TOPAS (TOOl for PArTicle Simulation), apontando referências favoráveis à implementação de ferramentas Monte Carlo como suporte ao ensino de Física Médica. O trabalho deu foco principal na deposição de dose em profundidade por feixes clínicos de fótons e elétrons, mostrando como a presença de heterogeneidades e o tamanho de campo afetam a deposição de dose. O uso de simulações de Monte Carlo com propósitos didáticos em Física das Radiações não é um tema comumente abordado a nível de graduação, sendo necessária uma iniciativa conjunta de professores e alunos para um estabelecimento da literatura.

Este Trabalho de Conclusão de Curso é o resultado acumulado de dois trabalhos, que tinham por objetivo principal continuar a usar o TOPAS como ferramenta didática para Física das Radiações, com foco em feixes de partículas carregadas pesadas, nas faixas de energia em que seriam utilizadas para hadronterapia. Assim, foram feitas validações de feixes de íons leves (Hélio e Carbono) e simulações didáticas para verificação da influência de heterogeneidade e energia para o alcance das partículas. A fundamentação teórica foi feita, principalmente, com base nos livros didáticos usados de bibliografia para Física

das Radiações, Attix (ATTIX, 1986) e Andreo (ANDREO et al., 2017), e nas minhas anotações das aulas de Física das Radiações I com o professor Eduardo Montenegro.

O objetivo principal deste trabalho é fornecer uma base teórica capaz de guiar estudantes universitários de Física das Radiações por um aprendizado prático usando o TOPAS MC. Para um aprofundamento nas funcionalidades do TOPAS, é recomendada a leitura de Perl e colaboradores (PERL et al., 2012) e de Faddegon e colaboradores (FADDEGON et al., 2020).

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 SEÇÃO DE CHOQUE E PROBABILIDADE

As interações de escala quântica são descritas de forma “discreta”, de maneira oposta à escala “contínua” da física clássica. Os eventos que ocorrem são de natureza estocástica. A probabilidade de uma interação específica acontecer é descrita pelo que se chama seção de choque. A seção de choque para um determinado evento pode ser descrita como “a razão entre o número de eventos desse tipo que ocorrem por unidade de tempo e centro espalhador do alvo, e o número relativo de partículas incidentes no alvo.” A Figura 1 mostra um esquema simplificado em 2D para a definição experimental de seção de choque na equação 2.1.

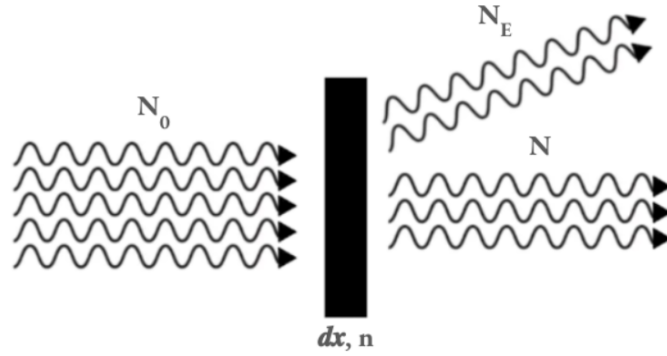


Figura 1 – Esquema para definição de seção de choque. Fonte: O autor.

$$\sigma = \frac{N_0 - N}{N_0 n dx} = \frac{N_e}{N_0 n dx}, \quad (2.1)$$

onde N_0 é o número de partículas incidentes, N_e é o número de partículas que realizaram a interação estudada, N é o número de partículas que não realizaram a interação estudada e n é o número de centros espalhadores, definido pelo número de átomos por volume irradiado do alvo de espessura dx .

Seção de choque é uma grandeza com dimensão de área, normalmente descrita em barns (10^{-24}cm^2). Logo, se tivermos a fluência de partículas do feixe — dada em número de partículas por área —, podemos determinar o número esperado de partículas que realizam o evento estudado, ou seja, a probabilidade de esse evento ocorrer.

Buscando uma definição quântica para a probabilidade de ocorrência de uma transição energética, é preciso saber qual será a natureza do Hamiltoniano de perturbação, H_p , de modo que seja possível analisar a superposição dos estados final e inicial do sistema. A equação 2.2 define a probabilidade transição de um estado Ψ_n para outro estado Ψ_m^* .

$$P(n \rightarrow m) = |\langle \Psi_m^* | H_p | \Psi_n \rangle|^2, \quad (2.2)$$

onde a notação de Dirac denota uma integral. Com isso, podemos inferir que a probabilidade de interação e, conseqüentemente, a seção de choque diminuem conforme a frequência associada ao estado final do sistema aumenta.

2.2 INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO COM A MATÉRIA

Radiação ionizante é toda radiação capaz de ionizar átomos do meio com o qual interage, sendo ou não capaz de depositar energia no meio por conta própria. Podemos classificar a radiação ionizante em dois tipos, de acordo com a deposição de dose que decorre da sua interação com a matéria. Radiação diretamente ionizante é toda partícula capaz de entregar dose em um volume. Entende-se deposição de dose como a perda de energia cinética da partícula por interações Coulombianas com os átomos do volume, de modo que apenas partículas com carga e massa se encaixam nessa definição. Radiação indiretamente ionizante é toda onda ou partícula incapaz de depositar dose em um volume senão pela transferência de energia para radiações diretamente ionizantes secundárias. Dessa forma, elétrons, pósitrons, prótons e partículas carregadas pesadas são tipos de radiação diretamente ionizante, enquanto que ondas ou partículas sem carga, como fótons e nêutrons, são tipos de radiação indiretamente ionizante.

2.2.1 Radiação indiretamente ionizante

Partículas sem carga não sofrem ação direta das forças Coulombianas das camadas eletrônicas ou do núcleo dos átomos, podendo apenas realizar interações com campos eletromagnéticos ou de força forte. Por causa disso, é possível que radiações desse tipo atravessem volumes sem interagir com o meio. A Figura 2 mostra a curva de atenuação de intensidade característica de fótons e nêutrons. Esse comportamento pode ser definido pela equação 2.3:

$$N = N_0 e^{-\mu L}, \quad (2.3)$$

onde N_0 é o número inicial de partículas, μ é o coeficiente de atenuação linear e L é a espessura do atenuador.

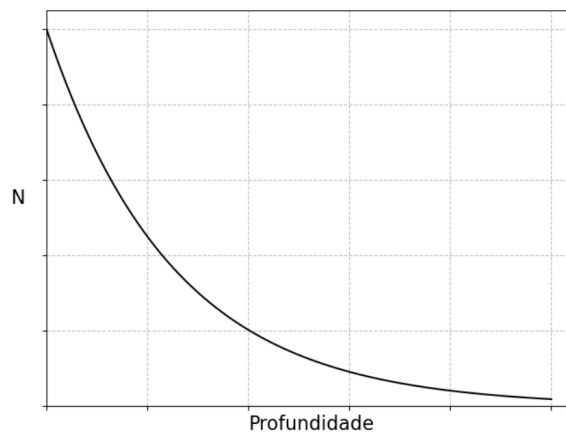


Figura 2 – Curva de atenuação exponencial de intensidade (número de partículas) característica de radiação indiretamente ionizante. Fonte: O autor.

2.2.1.1 Fótons

Fótons são ondas eletromagnéticas que, em uma interpretação corpuscular, são definidas como partículas de massa e carga zero. A energia do fóton é proporcional à sua frequência e define o tipo de interação que pode ocorrer quando interage com a matéria. Nas faixas de energia relevantes para a Física Médica, cinco interações são as mais importantes:

- Efeito fotoelétrico
- Efeito Compton (ou espalhamento incoerente)
- Produção de pares
- Espalhamento Rayleigh (ou espalhamento coerente)
- Efeito fotonuclear

Dessas cinco, se destacam as três primeiras, porque são as que mais contribuem para a deposição de dose no meio. A Figura 3, mostra a região de predominância de cada efeito por número atômico do meio e energia do fóton.

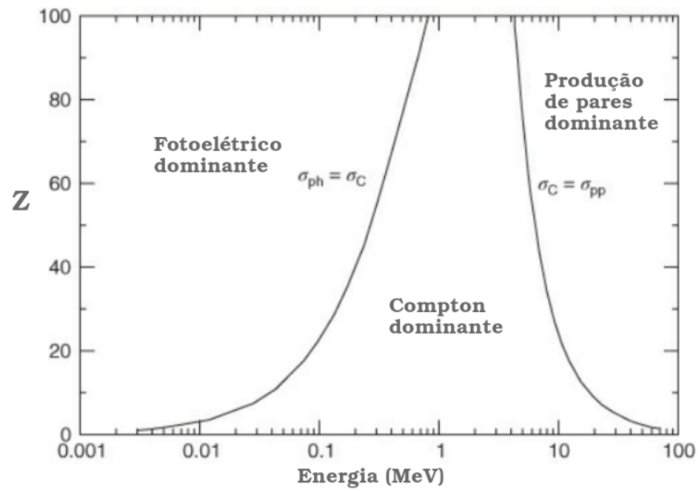


Figura 3 – Regiões de predominância de cada uma das três interações mais importantes que fótons realizam. As curvas indicam fronteiras onde as seções de choque para os respectivos efeitos são iguais. σ_{ph} , σ_C e σ_{pp} são as seções de choque para os efeitos fotoelétrico, Compton e produção de pares, respectivamente. Fonte: Figura traduzida e adaptada de ANDREO et al. (2017).

2.2.1.1.1 Efeito fotoelétrico

Quando um fóton transfere toda a sua energia para um elétron ligado, e esse elétron absorve toda a energia recebida em forma de energia cinética, o elétron é ejetado das camadas atômicas. A Figura 4 mostra um diagrama de energia para o efeito fotoelétrico.

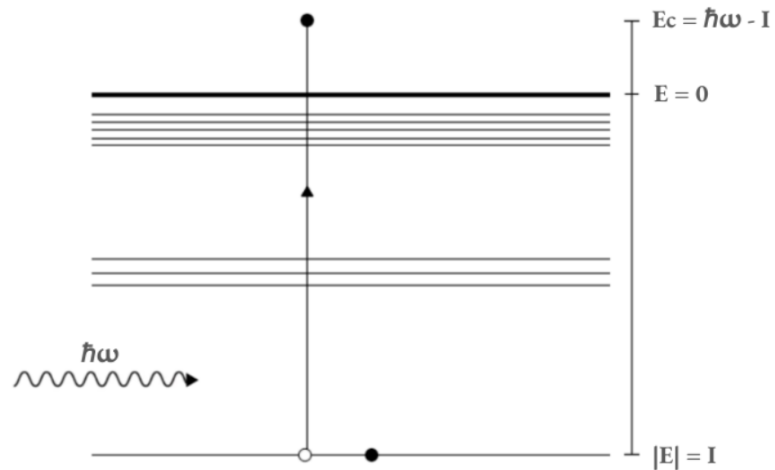


Figura 4 – Esquema de ionização de um elétron da camada K, onde $\hbar\omega$ é a energia do fóton incidente, I é o módulo da energia de ligação do elétron na camada e E_c é a energia cinética do fotoelétrico. Fonte: O autor.

Um diagrama de energia, como o mostrado na Figura 4 pode ajudar na visualização dos processos quânticos e será usado com frequência. Lembre que as partículas se encontram em estados de energia quantizada. Um poço de potencial se resume a níveis de energia negativa onde partículas podem ser encontradas, levando em conta que a barra de energia $E = 0$ denota partículas fora do poço com energia cinética $E_c = 0$. Podemos representar poços de potencial exclusivamente Coulombianos, no caso das camadas eletrônicas, e Coulombianos com força forte, no caso do núcleo. Nesse tipo de diagrama, pode ser mais fácil visualizar a conservação de energia.

Para entendermos a seção de choque para esse efeito, é interessante analisar a interação camada por camada, começando pela camada K. A seção de choque aumenta conforme a energia do fóton incidente diminui, até que chega ao seu valor máximo quando a energia do fóton é igual ao módulo da energia de ligação do elétron. Isso acontece por causa do comportamento da equação 2.2, onde uma alta energia cinética do elétron ejetado se traduz em uma alta frequência associada ao estado final Ψ_m^* do sistema perturbado. Esse processo só pode acontecer se o fóton tiver energia maior ou igual ao módulo da energia de ligação do elétron.

Caso o elemento possua elétrons em camadas mais externas, esse processo se repete. A seção de choque para emissão de fotoelétrons provenientes da camada L cresce conforme a energia do fóton incidente diminui, até seu valor máximo. O mesmo vale para as outras camadas. A Figura 5 mostra a seção de choque total do efeito fotoelétrico para o Ouro.

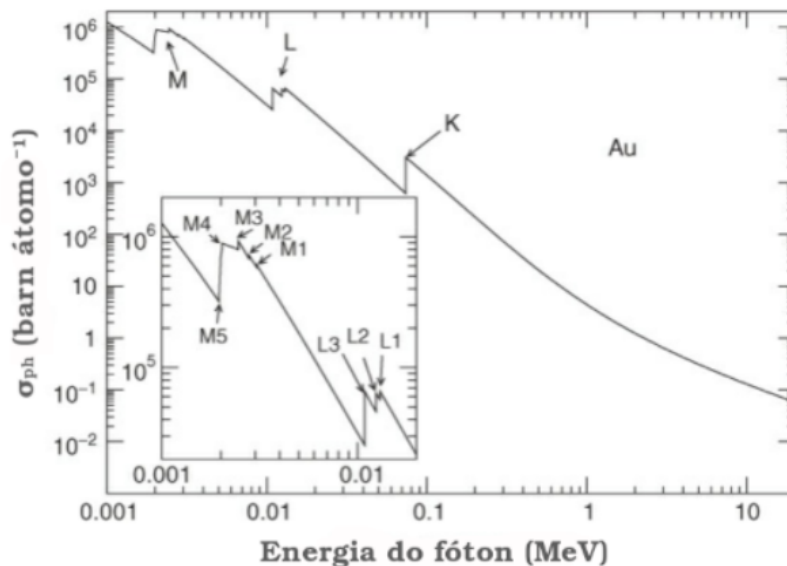


Figura 5 – Seção de choque total do efeito fotoelétrico para o Ouro. Podemos ver os picos condizentes com as energias de ionização das camadas eletrônicas K, L e M. Fonte: Figura traduzida e adaptada de ANDREO et al. (2017).

2.2.1.1.2 Efeito Compton

Quando um fóton transfere toda a sua energia para um elétron ligado, e esse elétron absorve apenas parte da energia recebida em forma de energia cinética, o elétron é ejetado das camadas atômicas, emitindo um fóton secundário espalhado. A Figura 6 mostra um diagrama de energia que mostra esse efeito.

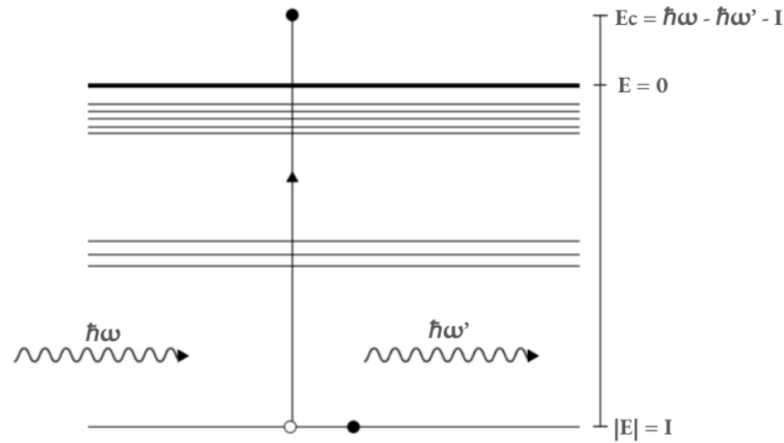


Figura 6 – Esquema de ionização de um elétron da camada K, onde $\hbar\omega$ é a energia do fóton incidente, $\hbar\omega'$ é a energia do fóton espalhado, I é o módulo da energia de ligação do elétron na camada e E_c é a energia cinética do elétron ejetado. Fonte: O autor.

Assim como a energia, o momento do sistema é conservado. A Figura 7 mostra um diagrama da cinemática do espalhamento Compton.

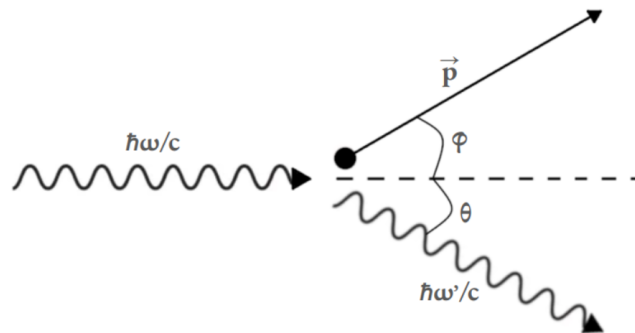


Figura 7 – Diagrama de conservação de momento, onde $\hbar\omega/c$ é o momento linear do fóton incidente, $\hbar\omega'/c$ é o momento linear do fóton espalhado a θ graus e $\vec{p}$ é o momento linear do elétron ejetado a ϕ graus. Fonte: O autor, inspirada em uma figura de ANDREO et al. (2017).

Para que o efeito Compton aconteça, é preciso que o fóton não só tenha energia suficiente para ionizar o átomo, mas também para que o elétron possa espalhar um fóton.

A seção de choque do efeito Compton derivada a partir de sua cinemática recebeu o nome de fórmula de Klein-Nishina. A seção de choque total de KN converge, em baixas energias de fóton, para a seção de choque Thomson, que trata de espalhamentos de fótons por elétrons em repouso. A seção de choque de transferência de energia leva em conta a perda de energia do fóton incidente, convergindo para zero quando o elétron não possui excesso de energia que seja dispersado por um fóton espalhado. A Figura 8 mostra ambas seções de choque.

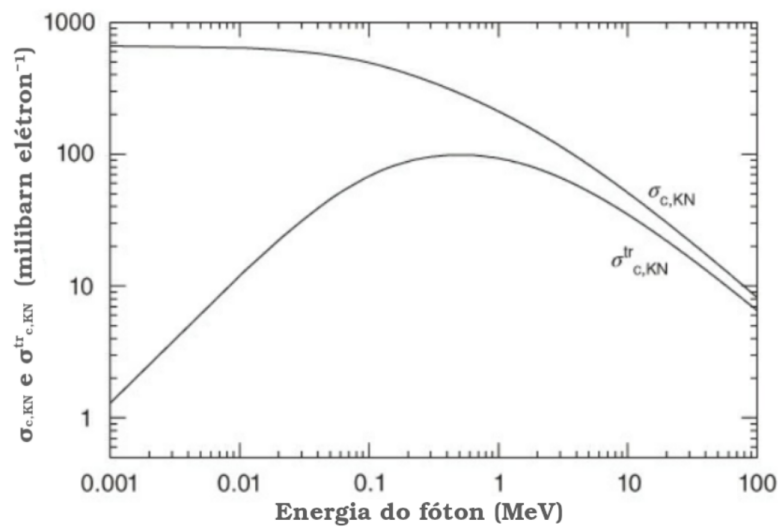


Figura 8 – Seções de choque para o efeito Compton, onde as curvas representadas por $\sigma_{c,KN}$ e $\sigma_{c,KN}^{tr}$ são calculadas pela fórmula de Klein-Nishina e pela fórmula de transferência de energia. Fonte: Figura traduzida e adaptada de ANDREO et al. (2017).

2.2.1.1.3 Produção de pares

Fótons muito energéticos podem ser absorvidos por um material atenuador, transferindo toda a sua energia para dar origem a um par partícula-antipartícula. A energia do fóton deve ser maior ou igual a duas massas de repouso da partícula. Por exemplo, para gerar um par elétron-pósitron, é necessário um fóton de, no mínimo, 1,022 MeV, já que a massa de repouso do elétron é de 0,511 MeV. Quanto maior for a energia do fóton, maior será a energia cinética das partículas geradas.

Para que haja conservação de momento, é necessária a presença de uma partícula que atue como receptora de recuo. Geralmente, esse receptor de recuo é o núcleo de um átomo presente no material atenuador, mas é possível que um elétron ligado cumpra esse papel. Um fóton com energia maior ou igual a quatro massas de repouso do elétron é capaz de transferir toda a sua energia para ionizar um átomo, gerando um par elétron-pósitron. Essa interação é chamada de produção de tripletos.

Para entendermos o fenômeno da produção de pares, podemos seguir pela interpretação de Dirac da fórmula relativística de energia cinética 2.4:

$$E^2 = m_0^2 c^4 + p^2 c^2 \rightarrow E = \pm \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}, \quad (2.4)$$

onde E é a energia de uma partícula com massa de repouso m_0 e momento linear relativístico p , com c sendo a velocidade da luz no vácuo.

Supondo a existência de estados negativos de energias de repouso, todos preenchidos por elétrons, seria possível que um fóton de energia suficiente fosse capaz de excitar um desses elétrons para um estado de energia de repouso positiva. Nessa interpretação, um pósitron seria um buraco nos estados negativos de energia de repouso, como mostra a Figura 9.

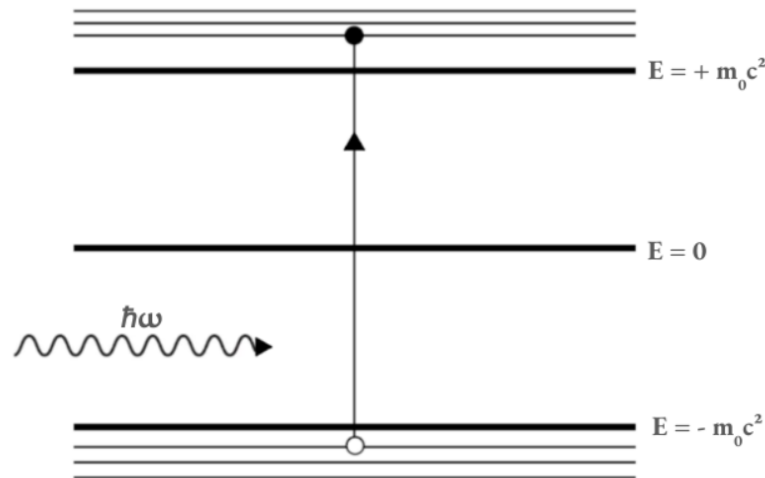


Figura 9 – Esquema de energia representativo da interpretação de Dirac para a produção de pares. Fonte: O autor.

Diferente dos efeitos fotoelétrico e Compton, a seção de choque para essa interação cresce conforme a energia do fóton aumenta. Pela teoria de Bethe e Heitler, a seção de choque diferencial, dada em barns por átomo, para a criação de um pósitron de energia T^+ e um elétron de energia $\hbar\omega - 2m_0c^2 - T^+$ é dada pela equação 2.5:

$$\frac{d\sigma}{dT^+} = \frac{e^4}{137 m_e^2 c^4} \frac{Z^2 P}{\hbar \omega}, \quad (2.5)$$

onde m_e e e são a massa de repouso e a carga do elétron, c é a velocidade da luz no vácuo e o parâmetro P é uma função de $\hbar \omega$ e Z .

2.2.1.1.4 Espalhamento Rayleigh

No espalhamento Rayleigh, o fóton interage elasticamente com um elétron das camadas atômicas, sendo espalhado sem perder energia. A seção de choque para esse efeito cresce conforme a energia do fóton incidente diminui e o número atômico do meio absorvedor aumenta. O ângulo de espalhamento do fóton em relação à incidência também depende desses fatores, fazendo com que o espalhamento Rayleigh seja mais relevante para baixas energias, quando o efeito Compton se torna menos provável.

2.2.1.1.5 Efeito fotonuclear

No efeito fotonuclear, um fóton com energia da ordem de alguns MeV pode interagir inelasticamente com o núcleo de um átomo. Nessa interação, nucleons podem ser excitados ou ejetados. Quando um próton é emitido dessa forma, indicado por uma reação (γ, p) , ele contribui para a deposição de dose no meio. Por ser muito pequena em comparação à da produção de pares, essa contribuição costuma ser desconsiderada na dosimetria. Reações onde há emissão de nêutrons, indicadas por (γ, n) , são mais relevantes para a Física Médica. Para feixes de raios X radioterápicos muito energéticos, é necessário levar em consideração a contaminação do feixe por nêutrons.

2.2.1.2 Nêutrons

Nêutrons interagem por meio da força forte e, junto a prótons, compõem os núcleos dos átomos. Eles interagem quase exclusivamente por colisões nucleares, sendo espalhados, capturados ou causando diversos tipos de reações nucleares. A Figura 10 mostra a seção de choque total para nêutrons em alguns materiais.

Diferente de prótons, nêutrons não sofrem repulsão Coulombiana do núcleo por não possuírem carga. Isso faz com que eles possam interagir com núcleos independentemente de sua energia cinética. Ou seja, prótons térmicos são incapazes de interagir com os campos de força forte dos núcleos, mas nêutrons térmicos podem fazê-lo. Por essa variedade de faixas energéticas de interação, foram definidos nomes específicos para nêutrons em cada uma delas. A Tabela 1 mostra os nomes de cada faixa e a Figura 11 mostra as principais interações que podem ocorrer em cada uma.

Assim como fótons, pela definição de radiação indiretamente ionizante, não se diz que nêutrons depositam dose. Para que haja deposição de dose no meio, os nêutrons precisam

Tabela 1 – Nomes dados a nêutrons por faixa energética.

Nome	Faixa energética
Frio	$E \ll 0,025 \text{ eV}$
Térmico	$E \approx 0,025 \text{ eV}$
Epitérmico	$1 \text{ eV} \leq E < 1 \text{ keV}$
Intermediário	$1 \text{ keV} \leq E < 50 \text{ keV}$
Rápido	$50 \text{ keV} \leq E < 20 \text{ MeV}$
Relativístico	$E > 20 \text{ MeV}$

Fonte: Tabela traduzida e adaptada de ANDREO et al. (2017).

transferir sua energia cinética para os núcleos dos átomos ou causar reações nucleares que emitam partículas carregadas. Para compreensão geral das interações de nêutrons com a matéria, serão comentados os processos de espalhamento elástico e captura de nêutrons.

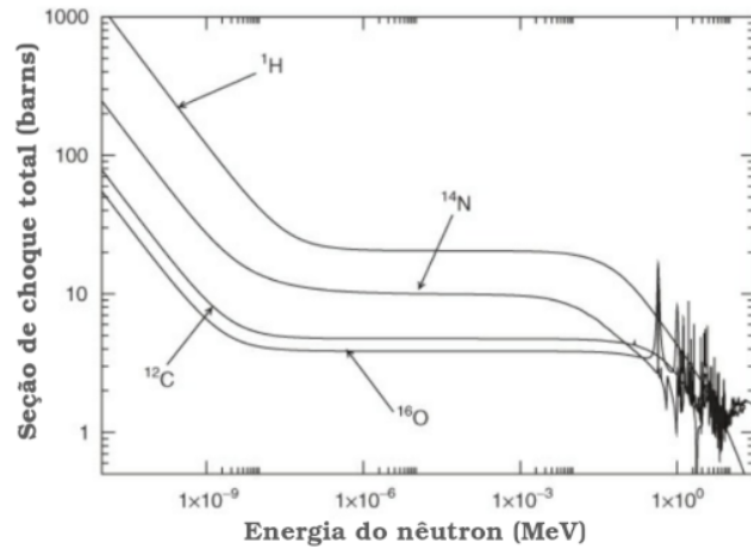


Figura 10 – Seção de choque total para nêutrons em H, N, O e C. Fonte: Figura traduzida e adaptada de ANDREO et al. (2017).

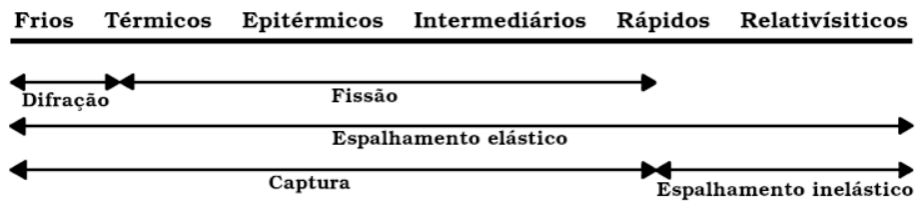


Figura 11 – Interações mais prováveis para cada tipo de nêutron. Fonte: Figura traduzida e inspirada em ANDREO et al. (2017).

2.2.1.2.1 Espalhamento elástico

Essa é a interação predominante para nêutrons intermediários e rápidos. Ela ocorre quando um nêutron interage com um núcleo sem fornecer energia suficiente para deixá-lo em um estado excitado. Pela conservação de energia e momento, podemos descrever a cinemática da interação pela equação 2.6:

$$m v_i^2 = M v^2 + m v_e^2, \quad (2.6)$$

com

$$m v_i = M v \cos \phi + m v_e \cos \theta,$$

$$0 = M v \sin \phi + m v_e \sin \theta,$$

onde m é a massa do nêutron, v_i é a velocidade do nêutron incidente, v_e é a velocidade do nêutron espalhado a um ângulo θ em relação à incidência, M é a massa do núcleo e v é a velocidade do núcleo espalhado a um ângulo ϕ em relação à incidência.

Após algumas manipulações algébricas, temos que o valor esperado da energia cinética do nêutron espalhado é dada pela fórmula 2.7:

$$\langle E_e \rangle = E_i \frac{m^2 + M^2}{(m + M)^2}, \quad (2.7)$$

onde E_e é a energia do nêutron espalhado, E_i é a energia do nêutron incidente, m é a massa do nêutron e M é a massa do núcleo.

Conforme o número de massa aumenta, a velocidade perdida pelo nêutron na colisão diminui. Isso nos leva a uma conclusão interessante: materiais de número atômico alto que servem de blindagem para fótons, como o Chumbo, não servem de blindagem para nêutrons. Um feixe de radiação contaminado por nêutrons pode depositar uma quantidade não desprezível de dose acima do valor esperado, dado que o corpo humano é constituído à base de C, H e O.

2.2.1.2.2 Captura

Conforme nêutrons são termalizados — perdem energia — pelas colisões elásticas, a seção de choque cresce para a captura desses nêutrons pelo núcleo, causando a emissão de prótons ou raios gama.

No corpo humano, as reações mais importantes acontecem com o ^{14}N , que captura um nêutron e emite um próton, se tornando ^{14}C , e com o ^1H , que captura um nêutron e emite um gama, se tornando ^2H .

Como é o caso do ^{14}N em ^{14}C , vemos que nêutrons são capazes de transformar os átomos do meio absorvedor em radionuclídeos com excesso de nêutrons. O nome desse processo é ativação por nêutrons. A Física Médica se vale disso para a geração de fontes radioativas, como o ^{60}Co para a teleterapia, o ^{192}Ir para a braquiterapia, o ^{99}Mo para a medicina nuclear diagnóstica e o ^{131}I para a medicina nuclear terapêutica.

2.2.2 Radiação diretamente ionizante

Diferente de radiações indiretamente ionizantes, que transferem energia de forma discreta, partículas carregadas perdem energia continuamente ao longo do caminho que percorrem. Essas partículas sofrem influência constante dos campos Coulombianos das camadas eletrônicas e do núcleo, nos quais depositam parte de sua energia cinética a cada interação. Isso indica que partículas carregadas possuem um alcance em função de sua energia cinética e do material atenuador.

Podemos dividir as partículas carregadas em dois grupos, de acordo com suas massas de repouso: as leves, como elétrons e pósitrons, e as pesadas, como prótons, partículas alfa e outros íons. As seções de choque de ambos os tipos dependem dos mesmos parâmetros de impacto, mas as interações que cada partícula pode realizar diferem em princípio, uma vez que prótons e nêutrons interagem com a força forte. A atenuação de partículas carregadas, portanto, não pode ser descrita por um decaimento exponencial, sendo diferente de acordo com a massa e a energia da partícula.

As figuras a seguir foram obtidas de simulações no TOPAS. A Figura 12 mostra a curva de fluência característica de elétrons primários. A Figura 13 compara a fluência de prótons primários de duas energias, mostrando as curvas características de partículas carregadas pesadas.

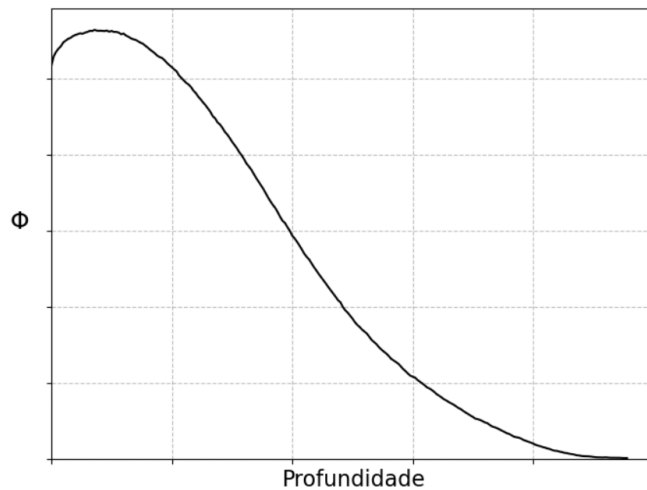


Figura 12 – Curva característica da fluência de elétrons primários. A simulação foi feita no TOPAS usando elétrons de 25 MeV em água. Fonte: O autor.

Essas figuras serão discutidas em mais detalhes nas seções específicas das interações de cada tipo de partícula carregada.

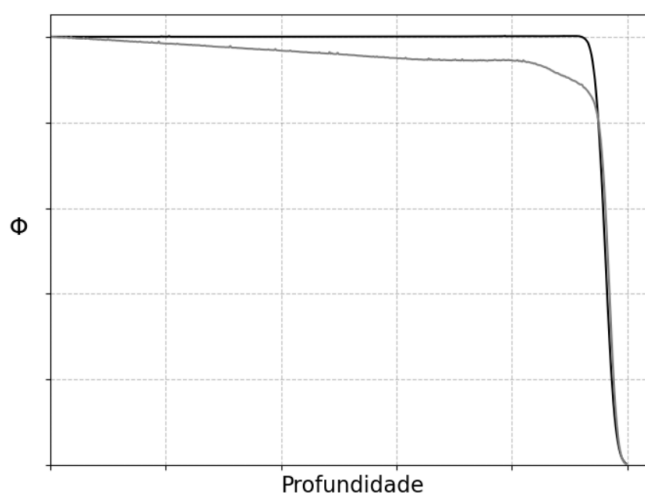


Figura 13 – Curvas características da fluência de prótons primários. As simulações foram feitas no TOPAS usando prótons de 5 MeV (curva preta) e 100 MeV (curva cinza) em água com o mesmo número de histórias e configurações semelhantes de geometria. A perda de fluência na curva de 100 MeV indica que os prótons primários realizaram reações nucleares. As curvas foram normalizadas para a mesma profundidade de alcance. Fonte: O autor.

A determinação das seções de choque é dada pela definição de um parâmetro de impacto que a partícula tem em relação a um átomo com que interage. A Figura 14, mostra as interações que partículas carregadas podem realizar para cada parâmetro de impacto.

2.2.2.1 Colisões inelásticas e *stopping power* eletrônico

Quando o parâmetro de impacto é muito maior que o raio atômico, a partícula tende a interagir com o átomo inteiro, e não com elétrons individuais. Esse tipo de interação recebeu o nome *soft* por causa da pouca deposição de energia no átomo, da ordem de poucos eV. Os eventos mais prováveis são a excitação ou expulsão de um elétron da camada de valência.

Colisões fracas possuem a maior seção de choque de ocorrência, já que parâmetros de impacto da ordem do raio atômico são muito raros. Assim, a contribuição de colisões desse tipo para a deposição de dose no meio chega a ser, aproximadamente, metade da total. Além disso, se as partículas possuírem energia cinética maior do que a velocidade da luz no meio absorvedor, pode haver a emissão de fótons de luz azulada, conhecida como radiação de Čerenkov.

Se o parâmetro de impacto for da ordem do raio atômico, o mais provável é que a partícula interaja com um elétron de uma camada interna, ionizando o átomo. Como o elétron ejetado nessa interação recebe uma energia cinética muito maior do que nas interações *soft*, esse tipo de colisão recebeu o nome de *hard*. Os elétrons secundários

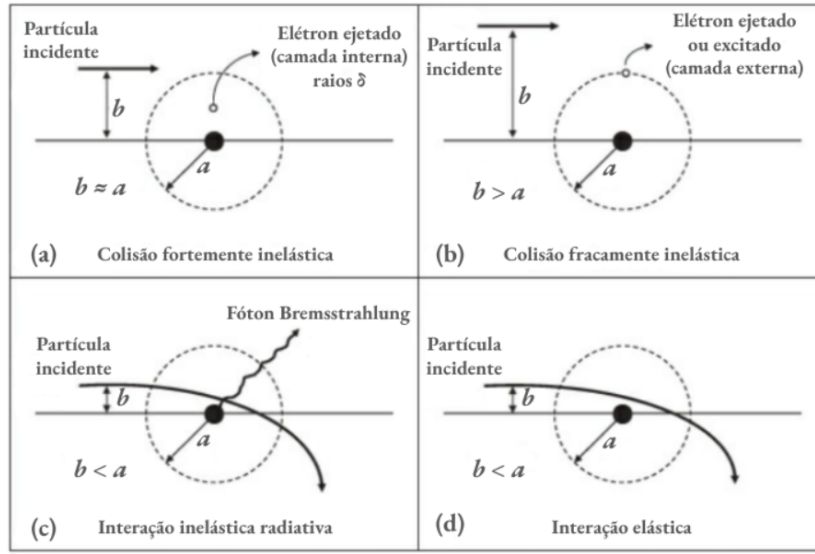


Figura 14 – As quatro interações principais para partículas carregadas: (a) colisão *hard*, (b) colisão *soft*, (c) emissão de raios X de freamento e (d) espalhamento elástico. Na figura, b é o parâmetro de impacto e a é o raio atômico. Além desses três, podemos imaginar um quarto parâmetro de impacto, no qual a partícula colide com o núcleo. Fonte: Figura traduzida e adaptada de ANDREO et al. (2017).

emitidos dessa forma, conhecidos como raios δ ou elétrons de *knock-on*, podem depositar sua energia ao longo do meio absorvedor por caminhos independentes dos traçados pelas partículas que os geraram.

Com essas duas colisões, podemos definir o primeiro termo da grandeza chamada *stopping power* ou poder de parada. O *stopping power* eletrônico ou colisional pode ser definido pela equação 2.8:

$$\frac{S_{el}}{\rho} = \frac{S_{el}^{soft}}{\rho} + \frac{S_{el}^{hard}}{\rho} = -\frac{dE}{\rho dx} = N_e \int_{W_{min}}^{W_{max}} W \frac{d\sigma}{dW} dW, \quad (2.8)$$

com

$$N_e = 6,02 \times 10^{23} \frac{Z}{A},$$

onde S_{el} é o *stopping power* eletrônico, ρ é a densidade do meio, $\frac{dE}{dx}$ é a taxa de perda energética em colisões por caminho percorrido, N_e é o número de elétrons por grama de material absorvedor e $\frac{d\sigma}{dW}$ é a seção de choque diferencial, por elétron, para colisões inelásticas que resultam em transferência de energia. Note que a integral cobre desde as trocas de energia mais baixas pelas colisões *soft* até as mais altas pelas colisões *hard*. A energia mínima é determinada pela energia de ligação do elétron mais fracamente ligado do alvo, sendo da ordem de alguns eV. Quanto à energia máxima, podemos ter uma ideia do limite superior de troca energética pela seção de choque de Rutherford. Para prótons e outras partículas pesadas, a energia máxima que pode ser transferida é dada por $2m_e c^2 \beta^2$.

2.2.2.2 Espalhamento elástico

Quando o parâmetro de impacto da partícula é muito menor que o raio atômico, ela tende a interagir com o campo Coulombiano do núcleo ao invés de elétrons nas camadas atômicas. Isso acontece porque a carga efetiva do núcleo vista pela partícula cresce para parâmetros de impacto menores, conforme o efeito de blindagem causado pelos elétrons diminui.

Nessa interação, as partículas depositam pouca ou nenhuma dose, uma vez que a perda de energia nas interações elásticas é desprezível em comparação com a perda em interações inelásticas. Para que haja conservação de momento, a partícula precisa perder uma pequena quantidade de energia, que será traduzida em um recuo do núcleo do átomo. Essa perda de energia pode ser relevante para partículas carregadas pesadas com energias muito baixas, da ordem de 20 keV para prótons e 150 keV para íons He.

O principal efeito que surge com interações elásticas é a mudança de direção e sentido da velocidade da partícula enquanto ela sofre influência da carga efetiva do núcleo. A Figura 14 mostra um efeito que seria observado para partículas negativamente carregadas, já que o núcleo possui carga positiva, mas partículas positivamente carregadas também são espalhadas. A mudança no vetor velocidade causada pelo espalhamento elástico pode ser desconsiderada para partículas carregadas pesadas, mas é o fator determinante na forma como a dose é depositada por elétrons e pósitrons. Como podemos ver pela Figura 13, o espalhamento elástico para prótons de 5 MeV é imperceptível, dado que a fluência se mantém constante até a profundidade do alcance do feixe.

Por outro lado, vemos na Figura 12 que a fluência de elétrons sobe até um valor máximo antes de cair continuamente até o ponto de alcance máximo. Isso acontece por causa dos espalhamentos elásticos, que fazem os elétrons depositarem energia ao longo de caminhos tortuosos pelo material. Quanto maior for o número atômico do material, maior será a carga efetiva do núcleo e maior será a influência do espalhamento elástico nas partículas.

2.2.2.3 Raios X *Bremsstrahlung* e *stopping power* nuclear

Outro processo que pode ocorrer com partículas leves em interações com um parâmetro de impacto muito menor que raio atômico em meios de alto número atômico é a emissão de raios X. Isso acontece porque partículas carregadas podem emitir radiação eletromagnética se forem aceleradas. A Figura 15 mostra um esquema simplificado de velocidade e aceleração de uma partícula negativamente carregada nesse parâmetro de impacto.

A aceleração paralela ao movimento é pouco interessante, uma vez que altera apenas o módulo da velocidade. A aceleração perpendicular ao movimento, porém, é capaz de gerar uma função densidade de probabilidade de emissão de um fóton. Para que isso aconteça, a partícula deve perder energia cinética igual à energia do fóton emitido. Esses fótons são chamados de raios X de freamento ou raios X *Bremsstrahlung*.

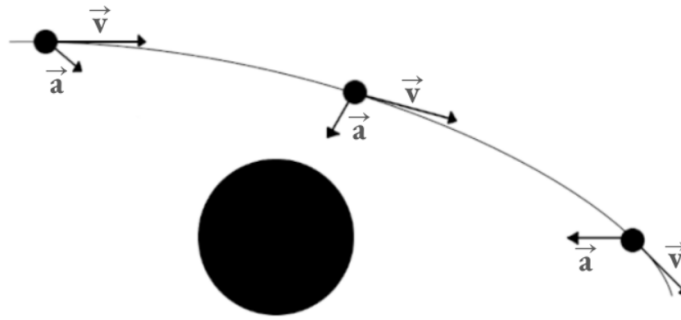


Figura 15 – Partícula negativamente carregada com velocidade v e aceleração a interagindo com parâmetro de impacto muito menor que o raio atômico. Fonte: O autor.

Esse fenômeno dá conta de 2% a 3% dos eventos que podem acontecer para esse parâmetro de impacto, mas, ainda assim, é de extrema importância para a Física Médica. Raios X gerados dessa forma são usados para Radiodiagnóstico com feixes de ortovoltagem, na faixa de 30 kV a 140 kV, e energias mais altas para Radioterapia, com feixes a partir de 4 MV.

Note pelos exemplos dados que é mais simples falarmos de fótons *Bremsstrahlung* pela diferença de potencial aplicada aos elétrons. Nesse sentido, um feixe de 100 kV teria elétrons acelerados até 100 keV e um feixe de 6 MV teria elétrons acelerados até 6 MeV. Isso é comum porque o espectro de emissão *Bremsstrahlung* compreende todas as energias até a energia máxima dos elétrons.

Como a energia do fóton emitido depende da energia cinética do elétron desacelerado, fótons de energias mais altas somente podem ser emitidos nas camadas superficiais do anteparo. Ainda que um elétron possa emitir fótons de todas as energias com igual probabilidade, ele perde energia enquanto entra no material. Dessa forma, a intensidade de fótons aumenta conforme a energia diminui. A Figura 16 ilustra esse fato, mostrando o espectro não atenuado de emissão *Bremsstrahlung*.

Outro fator que pode ser levado em conta é a atenuação que os fótons sofrem no próprio anteparo. Espera-se que a intensidade dos fótons de baixa energia diminua mais do que de altas energias. Isso ocorre devido à forma como fótons de alta energia podem ser emitidos.

Fótons emitidos dessa forma interagem como explicado em 2.2.1.1, ou seja, podem carregar essa energia para fora do volume, sem promover a deposição de dose. A energia perdida pelas partículas carregadas nessas interações nos fornece o segundo termo do *stopping power*. O *stopping power* nuclear ou radiativo pode ser definido pela equação 2.9:

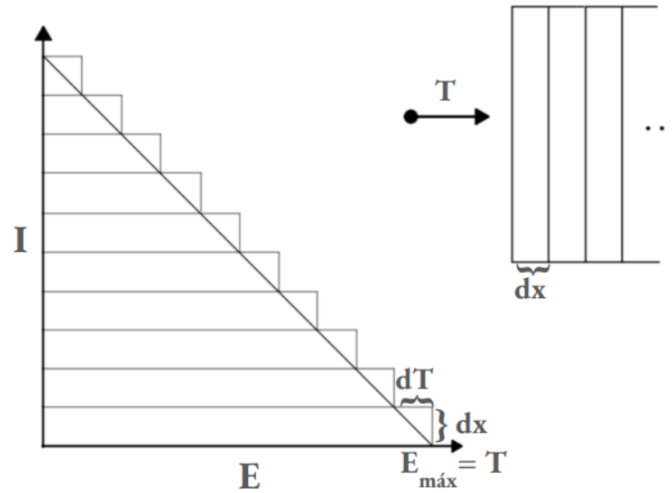


Figura 16 – Gráfico de intensidade por energia do fóton emitido. Podemos ver que a energia com menor intensidade de emissão é a energia máxima. Por exemplo, um feixe de radioterapia de 6 MV possui fótons de, no máximo, 6 MeV e energia média de, aproximadamente, 4 MeV. Fonte: O autor, inspirada em uma figura de ATTIX (1986).

$$\frac{S_{rad}}{\rho} = -\frac{dR}{\rho dx} = N_a \int_0^T k \frac{d\sigma}{dk} dk, \quad (2.9)$$

com

$$N_a = \frac{6,02 \times 10^{23}}{A}$$

onde S_{rad} é o *stopping power* radiativo, ρ é a densidade do meio, $\frac{dR}{dx}$ é a taxa de perda energética em forma de radiação por caminho percorrido, N_a é o número de átomos por grama de material absorvedor e $\frac{d\sigma}{dk}$ é a seção de choque diferencial, por átomo, para a emissão de fótons *Bremsstrahlung*. Note que a integração vai de zero até a energia máxima do elétron incidente.

2.2.2.4 Colisões nucleares

Partículas carregadas pesadas a altas energias — a partir de 30 MeV para prótons, por exemplo — podem interagir inelasticamente com o núcleo de um átomo, se o parâmetro de impacto indicar uma colisão com o núcleo. Isso pode causar uma reação nuclear em cadeia, na qual prótons ou nêutrons são ejetados, seguidos de raios gama de desexcitação.

Com isso, podemos entender a diferença de fluência entre as duas curvas mostradas na Figura 13. Prótons de 5 MeV não possuem energia suficiente para causarem reações nucleares inelásticas, por isso a fluência do feixe se mantém constante até a profundidade de alcance das partículas. Em contrapartida, prótons de 100 MeV possuem energia suficiente para isso, e a fluência de partículas primárias diminui a cada evento desse tipo.

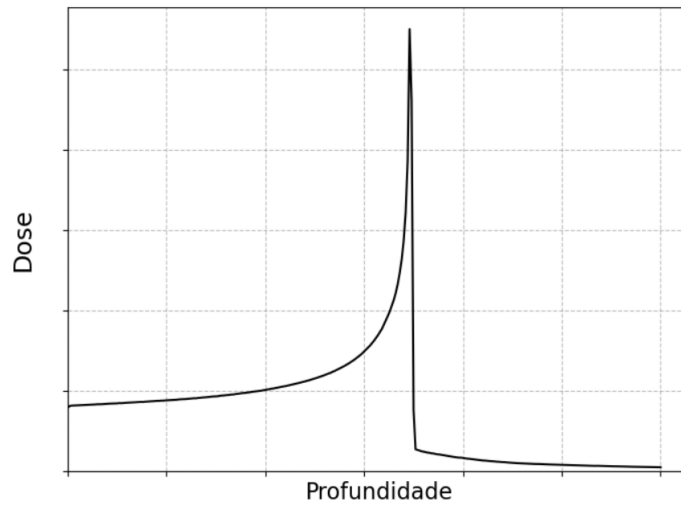


Figura 17 – Curva de deposição de dose em profundidade por um feixe de íons Carbono. A cauda de deposição de dose após o ponto de dose máxima (pico de Bragg) é causada por partículas produzidas em reações nucleares. Fonte: O autor.

Para partículas nucleadas mais pesadas, como íons Carbono ou Oxigênio, reações nucleares são ainda mais pronunciadas. Os produtos dessas reações em cadeia são responsáveis por uma cauda de dose considerável depois do pico de Bragg. Uma curva de deposição de dose em profundidade com essa característica pode ser vista na Figura 17.

Assim como reações de captura de nêutrons, reações nucleares com prótons são úteis para a produção de radioisótopos para a Física Médica. Por exemplo, o ^{18}F é produzido em ciclotrons na irradiação de água pesada com prótons em faixas de energia onde há reações do tipo $^{18}\text{O}(p, n)^{18}\text{F}$ — o próton é capturado pelo núcleo e um nêutron é emitido. O ^{18}F é, então, inserido em uma molécula de glicose no lugar de um O, formando o ^{18}F -FDG, que pode ser usado em PET (*Positron Emission Tomography* — Tomografia por Emissão de Pósitron).

2.2.2.5 Alcance

Com os dois tipos de stopping power, o eletrônico e o radiativo, podemos determinar o stopping power total, como mostra a equação 2.10:

$$\frac{S}{\rho} = \frac{S_{el}}{\rho} + \frac{S_{rad}}{\rho} = -\frac{dT}{\rho dx}, \quad (2.10)$$

onde $\frac{dT}{dx}$ é a taxa de perda energética por colisões e emissões radiativas por caminho percorrido no material absorvedor. Para partículas carregadas pesadas, a contribuição do termo de perdas radiativas pode ser desconsiderada.

Quanto menor for a energia das partículas, maior será o *stopping power*. Para partículas carregadas pesadas, a deposição de dose ocorre homogeneamente, no que se chama de *plateau* de dose, até que as ionizações se amontoam de forma a produzir um pico de dose máxima, chamado de pico de Bragg. O pico de Bragg de um feixe de íons Carbono pode ser visto na Figura 17.

Supondo que as partículas perdem energia continuamente ao longo do caminho de deposição de dose, podemos determinar um alcance aproximado. Para partículas carregadas pesadas, esse alcance é definido pela profundidade do pico de Bragg. O R_{CSDA} (*Continuously Slowing Down Approximation Range*) vale tanto para partículas leves como pesadas e pode ser determinado pela integral 2.11:

$$R_{CSDA} = \rho \int_0^R dx = \int_{T_0}^0 \frac{\rho dx}{dT} dT = \int_0^{T_0} S^{-1} dT, \quad (2.11)$$

onde R_{CSDA} é o alcance aproximado, S é o *stopping power* total e T_0 é a energia inicial das partículas do feixe.

O *stopping power* de um meio pode ser definido pela equação de Bethe 2.12, tirada de TURNER (2007):

$$-\frac{dT}{dx} = \frac{4\pi k_0^2 z^2 e^4 n}{m_e c^2 \beta^2} \left[\ln \frac{2m_e c^2 \beta^2}{I - (1 - \beta^2)} - \beta^2 \right], \quad (2.12)$$

com

$$k_0 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}, \quad \beta = \frac{v}{c},$$

onde ϵ_0 é a constante de permissividade elétrica do vácuo, z é o número atômico do meio, e é a carga do elétron, n é o número de elétrons por volume do meio, m_e é a massa de repouso do elétron, c é a velocidade da luz no vácuo, v é a velocidade da partícula incidente e I é a energia média de excitação do meio.

Manipulando essa expressão, podemos chegar à conclusão de que, para um mesmo meio absorvedor, o alcance de um feixe de partículas carregadas pesadas depende da massa, m , do número atômico, Z , e de um termo que depende da velocidade inicial, v_0 , da partícula (2.13):

$$R = \rho \int_0^R dx = - \int_{v_0}^0 \frac{m dv}{Z^2 f(v)} = \frac{m g(v_0)}{Z^2}, \quad (2.13)$$

Dessa fórmula de alcance, podemos tirar uma relação de alcance esperado para um feixe de partículas carregadas pesadas com velocidades não relativísticas. Essa aproximação será válida desde que as partículas tenham a mesma velocidade e as condições de feixe e alvo sejam mantidas. Podemos encontrar o alcance esperado R_2 de um feixe de partículas com Z_2 prótons e massa m_2 a partir de um alcance obtido R_1 de um feixe de partículas com Z_1 prótons e massa m_1 (2.14):

$$\frac{R_1}{R_2} = \frac{m_1 Z_2^2}{m_2 Z_1^2} \quad (2.14)$$

2.2.3 A matéria após a interação

O tópico anterior levou em consideração as interações da radiação com a matéria, focando nos efeitos imediatos. Evidentemente, os átomos do meio atingido por radiações ionizantes vão se comportar de forma a minimizar sua energia, se livrando dos ganhos energéticos que o tiraram do estado fundamental. Esse é o caso da fotodesexcitação, do efeito Auger e do decaimento radioativo. Nessa seção também será comentada a aniquilação de pares, mais especificamente a aniquilação do par elétron-pósitron.

2.2.3.1 Fotodesexcitação

Quando um elétron da banda de valência é ejetado do átomo, entende-se que o átomo continua no seu estado de menor energia. Por outro lado, quando um elétron de uma camada interna é ejetado, é criada uma vacância nas camadas eletrônicas do átomo. Para que o átomo nesse estado excitado perca energia, ele poderá emitir fótons de desexcitação, conhecidos como raios X característicos ou de fluorescência. A seção de choque para a fotodesexcitação aumenta para materiais de número atômico maior.

Os fótons são chamados de característicos porque suas energias dependem do número atômico do material, dado que vêm da diferença de energia entre uma camada e outra. Note que algumas transições energéticas são proibidas, não sendo possível a emissão de um único fóton. Isso pode criar estados metaestáveis, onde um átomo excitado não consegue preencher facilmente uma vacância interna, podendo possuir um tempo de meia-vida longo. A Figura 18 mostra um diagrama de energia para a fotodesexcitação.

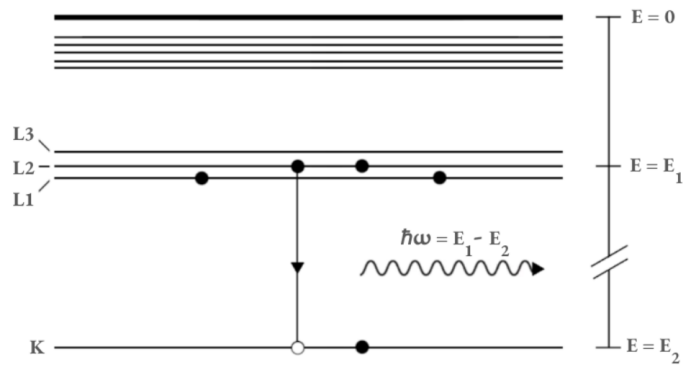


Figura 18 – Diagrama simplificado de energia para a emissão de raios X característicos. A energia do fóton é determinada pela diferença entre as energias inicial e final do elétron; note que a energia final é menor do que a inicial. Fonte: O autor.

A Figura 18 mostra uma transição possível, de L2 para K. A regra de possibilidade de transição serve tanto para excitação como desexcitação, sendo:

$$\Delta l = +1, -1,$$

$$\Delta j = 0, +1, -1,$$

onde l e j são os números quânticos de momento angular orbital e momento angular acoplado ao spin, respectivamente.

2.2.3.2 Efeito Auger

Além de liberar energia na forma de raios X, o átomo pode se autoionizar. Ou seja, o átomo ionizado X^+ se torna X^{2+} , emitindo um elétron. O objetivo de ocupar uma camada interna se mantém, mas a energia perdida é cedida a um elétron da mesma ou de outra camada em forma de energia cinética. O elétron gerado por essa autoionização é chamado de elétron Auger, e a seção de choque para esse evento diminui para meios de número atômico maior. A Figura 19 mostra um diagrama de energia para o efeito Auger.

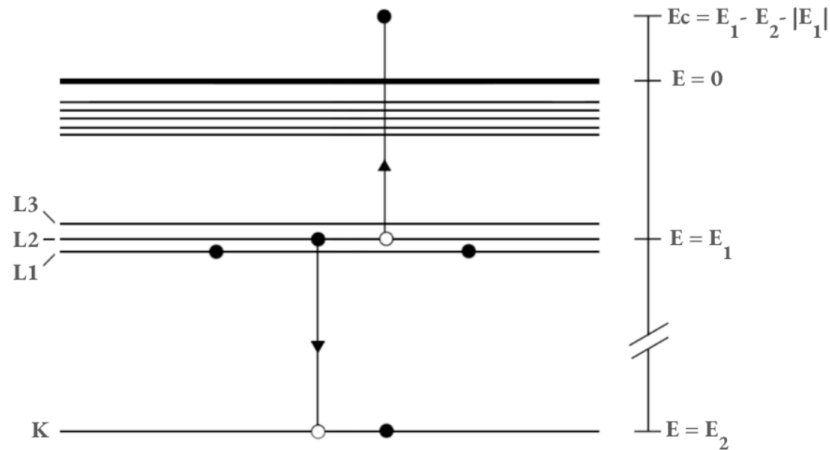


Figura 19 – Diagrama simplificado de energia para o efeito Auger. A Figura mostra um exemplo em que ambos os elétrons pertencem a L2, mas outras combinações de elétrons são possíveis. Fonte: O autor.

Esse efeito é importante para a Física Médica por causa da sua alta probabilidade de ocorrência para moléculas de baixo número atômico efetivo, como moléculas de água. Na radiólise da água, se um elétron de uma camada interna for ionizado, o efeito Auger pode acontecer, destruindo a molécula e liberando mais radicais livres. Isso, claramente, causa uma maior deposição de dose no meio comparado ao que seria depositado por fótons de fluorescência.

2.2.3.3 Eventos nucleares

Quando prótons, nêutrons ou núcleos mais pesados realizam reações nucleares, os átomos afetados podem ter seus novos núcleos em estados excitados. A fotodesexcitação também acontece em núcleos, mas chamamos de fótons gama aqueles que surgem do núcleo. O poço de potencial para um núcleo é diferente do poço Coulombiano das camadas eletrônicas e pode ser visto na Figura 20.

Outros tipos de decaimento que podem ser induzidos, como comentado anteriormente, são o β^+ e o β^- . O β^- pode ser induzido por captura de nêutrons e o β^+ pode ser consequência de reações nucleares com prótons. Esses processos acontecem porque prótons e nêutrons não são partículas fundamentais; são, na verdade, estados ligados de *quarks up* e *down*.

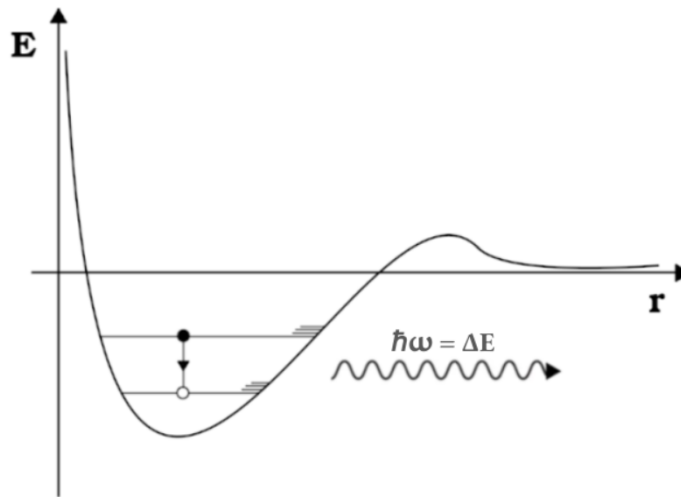


Figura 20 – Esquema simplificado de um poço de energia característico de núcleos. O raio gama emitido tem energia igual à diferença de energia do próton ou nêutron antes e depois do relaxamento. Fonte: O autor.

Considerando materiais de espessura maior do que o R_{CSDA} das partículas, os elétrons (β^-) depositam toda a sua energia no meio, mas pósitrons (β^+) podem não depositar toda a sua energia cinética.

Na protonterapia, os feixes clínicos de prótons possuem energias da ordem de 100 MeV, ou seja, têm energia suficiente para causar reações nucleares. Isso também se aplica a íons leves, na hadronterapia, com energias da ordem de 200 MeV/u (MeV por nucleon) para feixes de Carbono. Assim, feixes terapêuticos de prótons costumam depositar menos dose localmente nas profundidades de entrada, mas a dose espalhada pela radiação advinda de reações nucleares pode trazer consequências indesejadas para tecidos saudáveis em todo o corpo. Para protonterapia FLASH, com energias ainda maiores do que as convencionais, o aumento da dose em consequência de nêutrons é considerável (SOUZA, 2022).

2.2.3.4 Aniquilação de pares

Pósitrons podem ser gerados por fótons na produção de pares ou tripletos e por decaimento nuclear β^+ . Eles interagem com o meio de forma muito semelhante a elétrons, porque possuem a mesma massa e carga, em módulo. Assim, sua distribuição de fluência é determinada pelos espalhamentos elásticos e sua deposição de energia cinética acontece por colisões inelásticas. Quando, porém, o pósitron chega ao fim do seu caminho, ele é aniquilado junto de um elétron para a emissão de um, dois ou três fótons. A seção de choque de aniquilação de pósitrons cresce conforme o pósitron perde energia cinética.

A forma mais provável de aniquilação acontece quando um pósitron com energia cinética próxima do repouso colide com um elétron de uma camada externa. Na aniquilação em repouso, dois fótons de 0,511 MeV são emitidos na mesma direção e em sentidos opostos. Em aproximadamente 2% dos casos, o pósitron é aniquilado sem depositar toda a sua energia cinética. Na aniquilação em voo ainda são emitidos dois fótons, mas eles podem ter energias diferentes e não são emitidos na mesma direção. O ângulo que os fótons fazem com a direção de aniquilação depende da quantidade de energia cinética do pósitron que eles carregam.

Um tomógrafo PET na medicina nuclear diagnóstica é capaz de detectar esses fótons e determinar onde ocorreu a aniquilação. Modelos mais recentes incorporam o tempo de voo, caracterizado por uma distribuição probabilística de distância percorrida pelo pósitron no paciente antes de ser aniquilado. Como o ^{18}F -FDG é incorporado pelo organismo como glicose, a imagem obtida é chamada funcional; diferente da imagem anatômica que pode ser feita com raios X.

2.3 MONTE CARLO

O método de Monte Carlo se baseia no sorteio de números aleatórios para chegar a uma conclusão probabilística da ocorrência de eventos de natureza estocástica. Usar sorteios aleatórios é um aspecto negativo, porque a exatidão do resultado depende do número de experimentos realizados. Muitas vezes, esse tipo de solução consegue entregar o melhor resultado por tempo de computação. Em outras, uma tentativa de solução determinística é inviável, tornando esse método extremamente útil para problemas multidimensionais (KALOS; WHITLOCK, 2008).

Podemos, por exemplo, chegar no valor de π fazendo a seguinte simulação: sorteamos vários pontos em um eixo xy de $[0, 0]$ a $[1, 1]$ e vemos quantos se encontram dentro de uma circunferência de raio 1 pela fórmula 2.15:

$$x^2 + y^2 \leq 1 \quad (2.15)$$

A razão entre o número de pontos dentro da circunferência e o número total de pontos tende, no infinito, a $\frac{\pi}{4}$, já que essa é a razão entre as áreas. A Figura 21 mostra um exemplo de simulação.

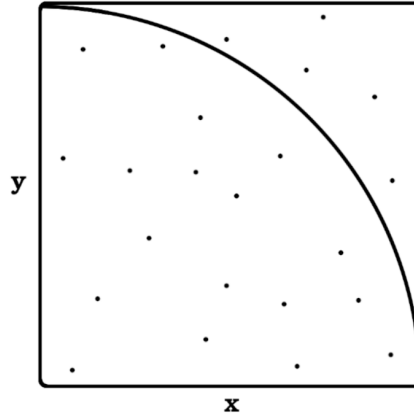


Figura 21 – Exemplo gráfico de simulação usando o método de Monte Carlo para a determinação de π . Quanto maior a quantidade de pontos sorteados, melhor será a estatística. Fonte: O autor.

O valor de π pode ser obtido por outras formas mais rápidas e exatas do que o método de Monte Carlo, mas, para várias aplicações, esse pode ser o único método eficaz para avaliar integrais (KALOS; WHITLOCK, 2008).

Na Física Médica, o método de Monte Carlo pode ser incorporado em ferramentas de cálculo de dose para a Radioterapia. Na Física de Partículas, em geral, vários códigos de Monte Carlo estão disponíveis no mercado, com os mais conhecidos sendo o GEANT4, o PENELOPE e o MCNPX. Eles incorporam várias seções de choque, sejam elas teóricas, experimentais ou híbridas, para simulações de transporte de energia na matéria.

Com computadores cada vez mais potentes, é possível realizar simulações complexas em poucas horas ou dias. Isso torna o método de Monte Carlo cada vez mais acessível a um ambiente acadêmico, estimulando os estudantes a aprenderem na prática os conceitos abordados em aula.

2.3.1 Distribuição da média de variáveis aleatórias

Para uma variável aleatória X , independente e identicamente distribuída, seu valor esperado $\langle X \rangle$ é a média da população. Conforme aumentamos o número N de experimentos, temos que a média $\bar{X}$ dos valores obtidos se aproxima do valor esperado. A convergência, quando o número de experimentos tende ao infinito, é garantida. Essa propriedade, chamada de lei dos grandes números, é descrita nas equações 2.16 e 2.17 (KALOS; WHITLOCK, 2008).

$$P(\lim_{N \rightarrow \infty} \bar{X} = \mu) = 1, \quad (2.16)$$

com

$$\bar{X} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i, \quad (2.17)$$

onde P é a probabilidade e μ é a média da população.

Ainda que não tenhamos acesso direto à variável X , a lei dos grandes números também opera em seus estimadores. Um estimador G , relacionado à variável desejada por um fator $g(X)$, tem que sua variância $var(G)$ é inversamente proporcional ao número de experimentos realizados. A inequação de Chebychev, descrita em 2.18, mostra que é possível diminuir a variância do estimador tanto quanto for necessário; basta aumentar o número de experimentos realizados.

$$P((G - \langle G \rangle)^2 \leq \frac{var(g(X))}{N\delta}) \leq \delta, \quad (2.18)$$

onde P é a probabilidade e δ é qualquer número positivo. Quanto mais próximo de zero for o δ desejado, maior deverá ser N .

2.3.2 Movimento Browniano

Chama-se movimento Browniano o deslocamento de partículas por caminhos aleatórios. Esse nome foi dado em homenagem a Robert Brown, o botânico que observou o movimento aleatório de partículas de pólen na superfície de água parada. Mais tarde, Albert Einstein descreveu matematicamente esse efeito, postulando que as moléculas da água colidiam com as partículas de pólen.

Em uma dimensão, temos 2.19 e 2.20:

$$P(x, t|x') \geq 0, \quad (2.19)$$

normalizada da forma

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x, t|x') dx = 1, \quad (2.20)$$

onde $P(x, t|x')$ é a probabilidade de encontrarmos a partícula no tempo $t + t'$ na posição x , dado que a partícula no tempo t' se encontra na posição x' .

Lidando com o transporte de radiação na matéria, a não normalização dessa condição permite que o caminho da partícula termine em x' com probabilidade $1 - P(x, t|x')$. Em suma, podemos atribuir probabilidades diferentes para cada nova posição que a partícula pode ou não tomar.

Por exemplo, uma partícula em $x = 0$ realiza N passos ao longo do eixo x com probabilidades $P(x^+) = P(x^-) = 0,5$. A distribuição de probabilidade de sua posição após esses passos será dada por uma gaussiana centrada na origem com uma largura a meia altura da ordem de $\sqrt{N}$.

2.3.3 TOPAS MC

O TOPAS é um código de Monte Carlo gratuito baseado no GEANT4. Ele foi criado inicialmente para servir de suporte ao cálculo de dose para protonterapia. Sua validação para feixes clínicos de prótons foi realizada no Massachusetts General Hospital por Testa e colaboradores (TESTA et al., 2018). Por ter uma arquitetura de simples instalação em sistemas Linux e não pressupor imediatamente um conhecimento de programação em linguagens como C++, o TOPAS se mostra bastante vantajoso para aplicações em ambientes acadêmicos.

O código-fonte é escrito em C++, como o GEANT4, mas nada é necessário para realizar simulações simples no TOPAS além de arquivos em formato txt. Esses arquivos devem conter os parâmetros da simulação. Podemos dividir os parâmetros necessários para a realização de simulações em quatro categorias: física (que inclui as bibliotecas de seções de choque), feixe, geometria e aquisição.

2.3.3.1 Biblioteca de seções de choque do TOPAS

A física do TOPAS, que determina as seções de choque utilizadas, pode ser definida pelo usuário. O TOPAS inclui módulos de física disponibilizados pelo grupo de desenvolvimento do GEANT4, mas os usuários podem criar seus próprios módulos de física. A física padrão do TOPAS costuma entregar bons resultados para a maioria das simulações, mas é necessário que seja validada para a situação estudada. A documentação do TOPAS (TOPAS...,) mostra a física padrão e explica em detalhes como é possível alterar a física das simulações. A documentação do GEANT4 (GEANT4...,) deve ser conferida para mais detalhes, porque fornece características gerais dos módulos individuais de física.

2.3.3.2 Feixe

Um feixe de partículas no TOPAS possui quatro características: de geometria, de partícula, de distribuição espacial e de número de histórias. A geometria indica a posição do feixe em relação à origem. Feixes podem ser mono ou polienergéticos, de modo que deve ser definida uma partícula (fóton, elétron, próton, ...) e sua(s) energia(s).

O feixe pode ser distribuído no espaço de forma linear (feixes paralelos) e/ou angular (feixes cônicos), mais intenso no centro (feixe gaussiano) ou uniformemente distribuído (feixe plano). Por fim, deve-se definir o número de partículas primárias do feixe. Uma história é definida como a vida da partícula desde a sua criação até o seu sumidouro, levando em conta toda a radiação secundária que surgiu por causa da sua interação com a matéria.

2.3.3.3 Geometria

No TOPAS, é possível criar geometrias para aplicações diversas. A primeira geometria, definida muitas vezes como padrão, é o mundo (*world*). O mundo da simulação é o lugar no qual geometrias e feixes podem ser criados e interagir, podendo ser de vácuo, ar ou qualquer outro material. Dentro dessa geometria, a sobreposição de estruturas gera um erro, impedindo a simulação de acontecer.

Dentro do *world*, podemos criar desde fantasmas homogêneos de água a estruturas compostas de subestruturas, cada uma feita de um material diferente. A geometria do feixe é definida por um componente que costuma ser chamado de *BeamPosition*. É recomendável que o usuário comece pelos exemplos fornecidos pelo próprio TOPAS na pasta de instalação do código e aumente a complexidade de suas simulações conforme se acostuma com a utilização do software.

Se um longo tempo de simulação não for inconveniente, podemos criar réplicas de aceleradores de partículas para gerar uma alteração no feixe de partículas primárias fiel à realidade. Por exemplo, podemos obter um feixe de fótons *Bremsstrahlung* não somente por inserção direta do espectro de energia nos parâmetros do arquivo, mas também pela irradiação de geometrias com material de número atômico alto com um feixe de elétrons.

Outra funcionalidade útil do TOPAS é a sua capacidade de ler arquivos DICOM (*Digital Imaging and COmmunications in Medicine*). Com isso, é possível simular irradiações em imagens tomográficas de fantasmas ou pessoas reais. As geometrias usadas nas simulações didáticas, mesmo que simples, podem servir de exemplo.

2.3.3.4 Aquisição ou *scoring*

Se a intenção da geometria é contabilizar grandezas, dizemos que ela é um *scorer* ou componente de aquisição. Podemos adquirir dados em geometrias no mundo de simulação ou criar geometrias em mundos paralelos especificamente para esse propósito. Uma geometria em mundo paralelo funciona da mesma forma que uma geometria dentro do *world*, mas não gera erros de sobreposição. Dosímetros em mundos paralelos recebem o material do meio onde estão inseridos e servem como dosímetros ideais. Para se estudar o efeito de heterogeneidade causado por dosímetros, deve-se usar geometrias dentro do *world*.

Todas as geometrias são divisíveis em *bins*, e isso determina, junto ao tamanho total da geometria, o tamanho do voxel. Quanto maior o número de *bins*, menor o voxel e melhor é a resolução, mas maior se torna a necessidade de aumentar o número de histórias. A vantagem de dosímetros em mundos paralelos é a possibilidade de melhorar a resolução apenas mudando o número de *bins* no eixo de irradiação, mantendo a geometria na qual ele está inserido com um único voxel (1 *bin* em x, y e z).

Todas as possibilidades de *scoring*, que vão muito além de dose absorvida e fluência de partículas, são explicadas na documentação do TOPAS (TOPAS...,). Para bem interpretarmos os resultados das simulações, devemos ter uma base firme de Física das Radiações e um espírito inquisitivo.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

3.1 TOPAS MC

O TOPAS foi escolhido por sua versatilidade e facilidade de uso. Os conceitos básicos de uso do TOPAS foram abordados na Fundamentação Teórica, restando apenas evidenciar aspectos específicos. Arquivos de texto baseados nos usados para as simulações podem ser encontrados no repositório GitHub (VASCONCELOS...).

Feixes de energias na faixa clínica de prótons foram previamente validados por outro grupo (TESTA et al., 2018). Para garantir a validade das simulações com íons Hélio e Carbono, foram feitas duas validações. Na primeira, foi validada uma física diferente da padrão para feixes de íons $^4\text{He}^{2+}$, usando dados do ASTAR (*Alpha STopping power And Range*) (NIST...) como referência para o alcance das partículas. Na segunda, foi validada a física padrão do TOPAS para feixes de íons $^{12}\text{C}^{6+}$, seguindo o modelo de validação que Lechner e colaboradores (LECHNER; INVANCHENKO; KNOBLOCH, 2010) realizaram para o GEANT4. Os dados experimentais foram obtidos dos grupos de Sihver (SIHVER; SCHARDT; KANAI, 1998) e Haettner (HAETTNER; IWASE; SCHARDT, 2006).

3.2 VALIDAÇÃO DO ALCANCE DE ÍONS HÉLIO EM ÁGUA

A Figura 22 mostra a física adaptada, *MyList*, para as irradiações com feixe de íons $^4\text{He}^{2+}$. Ela é igual à física padrão do TOPAS, exceto pela adição do módulo “g4em-dna_opt2”. Ele gere interações eletromagnéticas discretas para várias partículas, incluindo alfa e todos os íons até 300 MeV (GEANT4...). Apenas o processo de ionização, obtido a partir de interpolações de seções de choque de prótons, está presente para íons pesados (INCERTI et al., 2013).

```
2 s:Ph/ListOfNames = "MyList"
3 b:Ph/ListOfProcesses = "False"
4 s:Ph/MyList/Type = "Geant4_Modular"
5 sv:Ph/MyList/Modules = 7 "g4em-standard_opt4" "g4h-phy_QGSP_BIC_HP" "g4decay"
   "g4ion-binarycascade" "g4h-elastic_HP" "g4stopping" "g4em-dna_opt2"
6 d:Ph/MyList/EMRangeMin = 100. eV
7 d:Ph/MyList/EMRangeMax = 5. GeV
```

Figura 22 – Módulos de física usados para validação. Fonte: O autor.

As energias escolhidas para as simulações foram de 50 a 800 MeV, em passos de 50 MeV. Em todas as simulações, foi adquirida a dose absorvida, *DoseToMedium*, em um dosímetro em mundo paralelo de $1 \times 1 \times 30 \text{ cm}^3$ inserido em um fantoma de água de $10 \times 10 \times 30 \text{ cm}^3$.

Um feixe circular plano paralelo de $\pi \text{ cm}^2$ foi posicionado no eixo de irradiação a 100 cm de distância do fantoma em um mundo de vácuo. O número de *bins* do dosímetro foi escolhido para que o tamanho do voxel ao longo do eixo de irradiação fosse de 0,1 cm. Os resultados obtidos foram comparados com a tabela ASTAR (NIST...,).

3.3 VALIDAÇÃO DO ALCANCE DE ÍONS CARBONO EM ÁGUA

As energias escolhidas para as simulações — 195, 200, 270 e 400 MeV/u — foram baseadas na validação do GEANT4 feita por Lechner e colaboradores (LECHNER; INVANCHENKO; KNOBLOCH, 2010), utilizando os dados experimentais obtidos por Sihver e colaboradores (SIHVER; SCHARDT; KANAI, 1998) e Haettner e colaboradores (HAETTNER; IWASE; SCHARDT, 2006). Em todas as simulações, a energia depositada, *EnergyDeposit*, foi adquirida em um dosímetro em mundo paralelo de $6 \times 6 \times 30 \text{ cm}^3$ inserido em um fantoma de $10 \times 10 \times 30 \text{ cm}^3$ de água. Um feixe circular plano paralelo de $\frac{\pi}{16} \text{ cm}$ foi posicionado no eixo de irradiação a 100 cm de distância do fantoma em um mundo de vácuo. O número de *bins* do dosímetro foi escolhido para que o tamanho do voxel ao longo do eixo de irradiação fosse de 0,05 cm. A Figura 23 mostra a definição dessas geometrias no TOPAS.

```

37 s:Ge/Water/Type      = "TsBox"
38 s:Ge/Water/Parent    = "World"
39 s:Ge/Water/Material  = "G4_WATER"
40 d:Ge/Water/HLX       = 5. cm
41 d:Ge/Water/HLY       = 5. cm
42 d:Ge/Water/HLZ       = 15. cm
43 i:Ge/Water/XBins     = 1
44 i:Ge/Water/YBins     = 1
45 i:Ge/Water/ZBins     = 1
46 d:Ge/Water/RotX      = 180. deg
47 d:Ge/Water/RotY      = 0. deg
48 d:Ge/Water/RotZ      = 0. deg
49 s:Ge/Water/Color     = "Blue"
50
51 s:Ge/Dosimeter/Type   = "TsBox"
52 s:Ge/Dosimeter/Parent = "World"
53 b:Ge/Dosimeter/IsParallel = "True"
54 d:Ge/Dosimeter/HLX    = 3. cm
55 d:Ge/Dosimeter/HLY    = 3. cm
56 d:Ge/Dosimeter/HLZ    = 15. cm
57 i:Ge/Dosimeter/XBins  = 1
58 i:Ge/Dosimeter/YBins  = 1
59 i:Ge/Dosimeter/ZBins  = 600
60 d:Ge/Dosimeter/RotX   = 180. deg
61 d:Ge/Dosimeter/RotY   = 0. deg
62 d:Ge/Dosimeter/RotZ   = 0. deg
63 d:Ge/Dosimeter/TransX = 0. cm
64 d:Ge/Dosimeter/TransY = 0. cm
65 d:Ge/Dosimeter/TransZ = 0. cm

```

Figura 23 – Geometrias do fantoma e do dosímetro usadas nas simulações. Fonte: O autor.

Os resultados foram comparados com os dados experimentais obtidos da Figura 2 de Lechner e colaboradores (LECHNER; INVANCHENKO; KNOBLOCH, 2010) com o aplicativo online gratuito PlotDigitizer (PLOTDIGITIZER...,).

3.4 SIMULAÇÕES DIDÁTICAS

Foram feitas duas simulações didáticas. A primeira com fantasmas de água e osso-água para determinar a influência da presença de osso no alcance de feixes monoenergéticos de prótons. A segunda com partículas carregadas pesadas de massas diferentes para verificar a validade da equação 2.14 em determinar alcances.

3.4.1 Influência da heterogeneidade osso-água no alcance de feixes monoenergéticos de prótons

As simulações foram feitas usando a física padrão em um mundo de vácuo, com os materiais de água e osso sendo definidos, respectivamente, como "G4_WATER" e "G4_B-100_BONE". Todas as simulações foram feitas com as mesmas condições de geometria e feixe para três energias em dois fantasmas diferentes.

Em cada simulação, foram usados feixes circulares planos paralelos de $\pi \text{ cm}^2$ a 100 cm do fantoma. Para determinar a influência da energia, foram usados prótons monoenergéticos de 70, 100 e 120 MeV, com 10^6 histórias cada.

```

7 s:Ge/Skull/Type      = "TsBox"
8 s:Ge/Skull/Parent    = "World"
9 #s:Ge/Skull/Material = "G4_WATER"
10 s:Ge/Skull/Material = "G4_B-100_BONE"
11 d:Ge/Skull/HLX       = 9. cm      #Y rotacionado para X
12 d:Ge/Skull/HLY       = 11. cm     #Z rotacionado para Y
13 d:Ge/Skull/HLZ       = 0.4 cm     #X rotacionado para Z
14 i:Ge/Skull/XBins     = 1
15 i:Ge/Skull/YBins     = 1
16 i:Ge/Skull/ZBins     = 1
17 d:Ge/Skull/RotX      = 180. deg
18 d:Ge/Skull/RotY      = 0. deg
19 d:Ge/Skull/RotZ      = 0. deg
20 d:Ge/Skull/TransX    = 0. cm
21 d:Ge/Skull/TransY    = 0. cm
22 d:Ge/Skull/TransZ    = Ge/Brain/HLZ + Ge/Skull/HLZ cm
23
24 s:Ge/Brain/Type      = "TsBox"
25 s:Ge/Brain/Parent    = "World"
26 s:Ge/Brain/Material  = "G4_WATER"
27 d:Ge/Brain/HLX       = 9. cm      #Y rotacionado para X
28 d:Ge/Brain/HLY       = 11. cm     #Z rotacionado para Y
29 d:Ge/Brain/HLZ       = 6. cm      #X rotacionado para Z
30 i:Ge/Brain/XBins     = 1
31 i:Ge/Brain/YBins     = 1
32 i:Ge/Brain/ZBins     = 1
33 d:Ge/Brain/RotX      = 180. deg
34 d:Ge/Brain/RotY      = 0. deg
35 d:Ge/Brain/RotZ      = 0. deg

```

Figura 24 – Definições de geometrias de osso (*Skull*) e água (*Brain*) para o fantoma heterogêneo. A irradiação do feixe se deu ao longo do eixo z no TOPAS. Para que o fantoma se torne homogêneo, basta descomentar a linha 9 e comentar a linha 10 do código. Fonte: O autor.

Foram usados dois fantasmas: um fantoma homogêneo de água; e um fantoma com uma fina camada de osso na frente de um bloco homogêneo de água. O tamanho dos fantasmas foi definido a partir de medidas padrão de uma cabeça humana, com $12,8 \times 18 \times 22 \text{ cm}^3$. No fantoma heterogêneo, a camada de osso mede $0,8 \text{ cm}$ para simular a espessura média do crânio na lateral da cabeça. A irradiação do feixe se deu ao longo do eixo x. Como os dois fantasmas têm o mesmo tamanho total, o tamanho do voxel do dosímetro ao longo do eixo x foi definido como $0,02 \text{ cm}$ para ambos.

Os alcances de cada irradiação nos dois fantasmas foram comparados entre si e com os alcances de prótons em água da tabela PSTAR (*Proton STopping power And Range*) (NIST...,). A Figura 24 mostra os parâmetros de geometria usados na definição dos fantasmas.

3.4.2 Alcance esperado de partículas carregadas pesadas

Todas as simulações foram feitas usando a física adaptada, mostrada na Figura 22, em um mundo de vácuo com os mesmos parâmetros de feixe: circular plano de área $\pi \text{ cm}^2$ a 100 cm de distância do fantoma. O mesmo fantoma e dosímetro foram usados na aquisição de dados: geometria de $10 \times 10 \times 40 \text{ cm}^3$ de “G4_WATER” e um dosímetro em mundo paralelo de $0,5 \times 0,5 \times 40 \text{ cm}^3$.

As partículas e suas respectivas energias foram: prótons de 150 MeV , dêuterons de 300 MeV , íons $^4\text{He}^{2+}$ de 600 MeV e íons $^{12}\text{C}^{6+}$ de 1800 MeV . 10^7 histórias entregaram bons resultados para $0,033 \text{ cm}$ de tamanho do voxel no eixo de irradiação. As tabelas PSTAR e ASTAR (NIST...,) foram usadas de referência para prótons e íons Hélio. A Figura 25 mostra a definição do feixe para íons Hélio.

```

72 s:Ge/BeamPosition/Parent = "World"
73 s:Ge/BeamPosition/Type   = "Group"
74 d:Ge/BeamPosition/TransX = 0. m
75 d:Ge/BeamPosition/TransY = 0. m
76 d:Ge/BeamPosition/TransZ = 120. cm
77 d:Ge/BeamPosition/RotX   = 180. deg
78 d:Ge/BeamPosition/RotY   = 0. deg
79 d:Ge/BeamPosition/RotZ   = 0. deg
80
81 s:So/ParticleSource/Type      = "Beam"
82 s:So/ParticleSource/Component = "BeamPosition"
83 s:So/ParticleSource/BeamParticle = "alpha"
84 d:So/ParticleSource/BeamEnergy  = 600 MeV
85 s:So/ParticleSource/BeamPositionDistribution = "Flat"
86 s:So/ParticleSource/BeamPositionCutoffShape = "Ellipse"
87 d:So/ParticleSource/BeamPositionCutoffX    = 1. cm
88 d:So/ParticleSource/BeamPositionCutoffY    = 1. cm

```

Figura 25 – Definição de parâmetros do feixe. Note que o feixe precisa ser deslocado apenas pelo tamanho HLZ do fantoma, dado que todas as estruturas do TOPAS são criadas na origem. Fonte: O autor.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 VALIDAÇÃO DO ALCANCE DE ÍONS HÉLIO EM ÁGUA

A Figura 26 mostra as curvas de PDP (Percentual de Dose em Profundidade) para íons Hélio de 800 MeV, comparando a física padrão do TOPAS com a física adaptada mostrada na Figura 22.

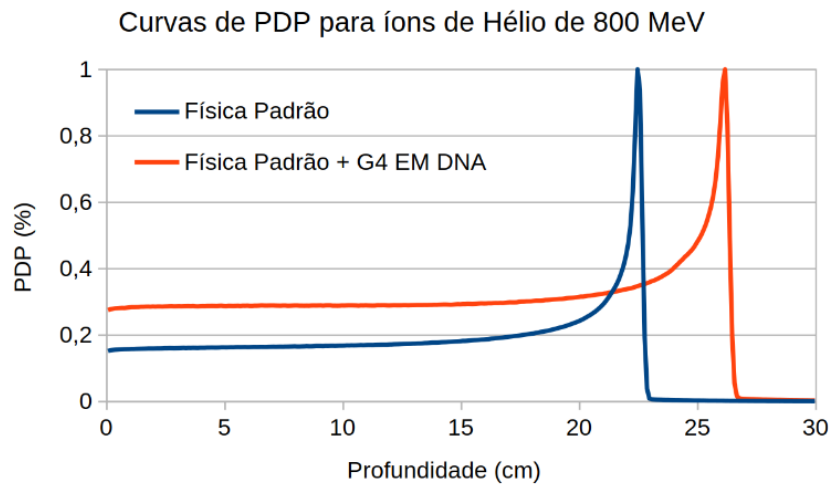


Figura 26 – Curvas de PDP para íons Hélio de 800 MeV. As curvas foram normalizadas para 100% na dose máxima. Fonte: O autor.

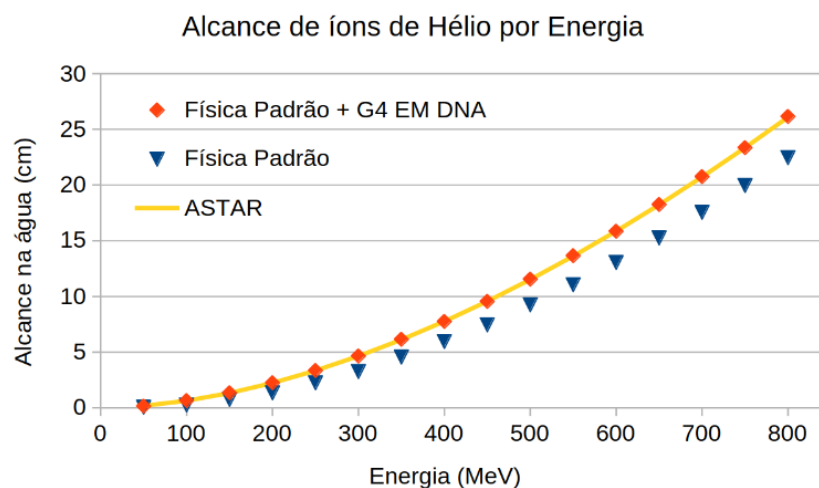


Figura 27 – Comparação de alcances obtidos para ambas as físicas com valores da tabela ASTAR (NIST...,). Fonte: O autor.

Podemos ver uma diferença notável nos alcances obtidos nas simulações. Com o módulo de física "g4em-dna_opt2", a diferença para o feixe de 800 MeV foi de 3,7 cm, um aumento de 16% em relação ao alcance simulado com a física padrão. Essa diferença é maior em percentual para baixas energias, de modo que, para 50 MeV, o alcance do feixe com a física adaptada é o triplo do alcance do feixe com a física padrão.

A Figura 27 compara os alcances da tabela ASTAR (NIST...,) com ambas as físicas. Para cada energia, a diferença entre o alcance da tabela ASTAR e o alcance simulado com a física adaptada é menor do que a resolução de voxel. Isso mostra que há uma concordância em menos de um desvio padrão para o tamanho de voxel usado.

4.2 VALIDAÇÃO DO ALCANCE DE ÍONS CARBONO EM ÁGUA

A Figura 28 compara as simulações no TOPAS com os dados experimentais dos grupos de Sihver (SIHVER; SCHARDT; KANAI, 1998) e Haettner (HAETTNER; IWASE; SCHARDT, 2006). As curvas foram normalizadas para 1 na energia depositada de entrada.

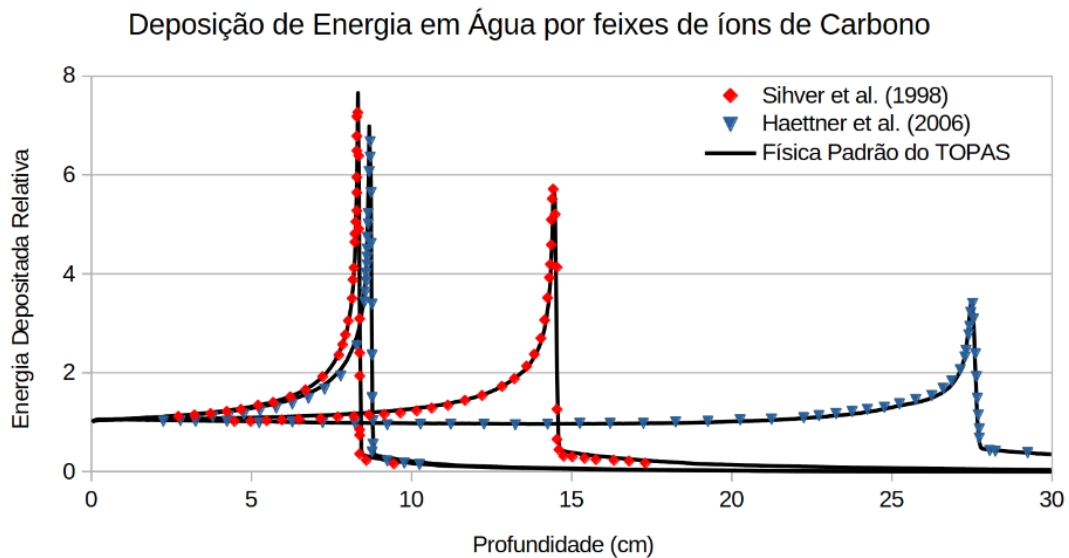


Figura 28 – Energia depositada por feixes de íons Carbono de 195 MeV/u, 200 MeV/u, 270 MeV/u e 400 MeV/u. Fonte: O autor.

Os resultados obtidos para o TOPAS coincidem com os obtidos na validação do GEANT4 feita por Lechner e colaboradores (LECHNER; INVANCHENKO; KNOBLOCH, 2010). Isso mostra que a física padrão do TOPAS é adequada para realizar simulações com íons Carbono nessa faixa energética, assim como o GEANT4.

Diferente de íons Hélio, não houve necessidade de alterar a física padrão do TOPAS para validar as simulações de íons Carbono. Em todos os testes feitos comparando a física padrão do TOPAS com a física adaptada, não foi observada uma diferença significativa para feixes de íons Carbono.

4.3 SIMULAÇÕES DIDÁTICAS

Para a primeira simulação, era esperado que a camada de osso influenciasse no alcance dos feixes de prótons. Para verificar se a distância entre os picos de Bragg era relevante estatisticamente, foi feito um teste Z contando a resolução de voxel.

Para a segunda simulação, era esperado que a equação 2.14 fosse uma boa aproximação para os alcances das partículas. Para verificar se a diferença entre os alcances esperados e simulados era relevante estatisticamente, também foi feito um teste Z para a resolução usada.

4.3.1 Influência da heterogeneidade osso-água no alcance de feixes monoenergéticos de prótons

A Figura 29 compara as curvas de PDP para prótons de 100 MeV nos dois fantasmas. Visualmente, existe uma diferença clara entre as duas curvas.

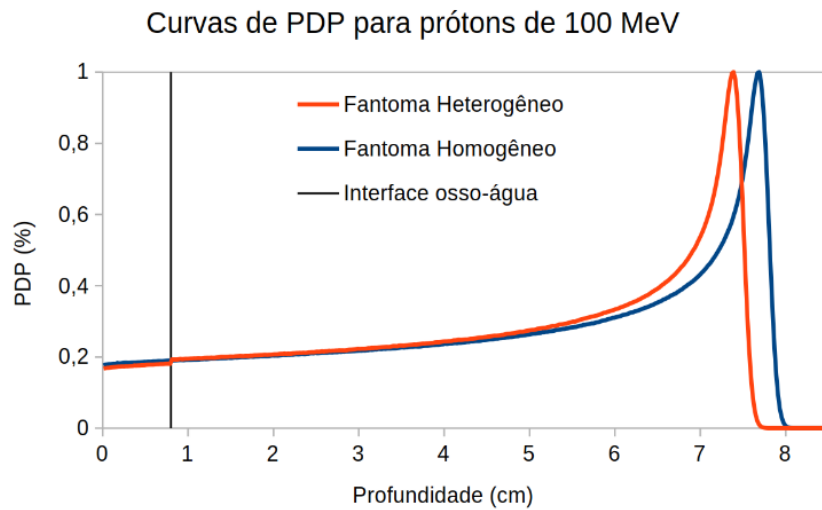


Figura 29 – Curvas de PDP para prótons de 100 MeV nos dois fantasmas. A linha vertical indica a interface osso-água para a curva do fantoma heterogêneo. As curvas foram normalizadas para 100 % na dose máxima. Fonte: O autor.

Para uma análise quantitativa, foi determinada a diferença de profundidade dos picos de Bragg. A Tabela 2 compara os alcances obtidos para as energias nos dois fantasmas com os valores da tabela PSTAR.

Tabela 2 – Alcances obtidos para as energias nos dois fantasmas comparados com o alcance da tabela PSTAR.

Alcance	70 MeV	100 MeV	120 MeV
R_{CSDA} PSTAR	4,080 cm	7,718 cm	10,66 cm
R_{CSDA} no fantoma homogêneo	$4,07 \pm 0,02$ cm	$7,67 \pm 0,02$ cm	$10,61 \pm 0,02$ cm
R_{CSDA} no fantoma heterogêneo	$3,77 \pm 0,02$ cm	$7,39 \pm 0,02$ cm	$10,31 \pm 0,02$ cm

Fonte: O autor.

Um teste Z indica uma diferença em até 3,7 desvios padrões entre os alcances para esse tamanho de voxel. Com isso, podemos rejeitar a hipótese de que os valores são iguais com um nível de significância de 0,1%.

4.3.2 Alcance esperado de partículas carregadas pesadas

A Figura 30 mostra as curvas de PDP para prótons, dêutrons, íons Hélio e íons Carbono. Em relação ao alcance dos prótons, aproximadamente, os dêutrons possuem o dobro do alcance, íons Hélio têm o mesmo alcance e íons Carbono, um terço do alcance. Note que todas as partículas tinham a mesma energia de 150 MeV/u, dado que isso é necessário para a equação 2.14 ser válida.

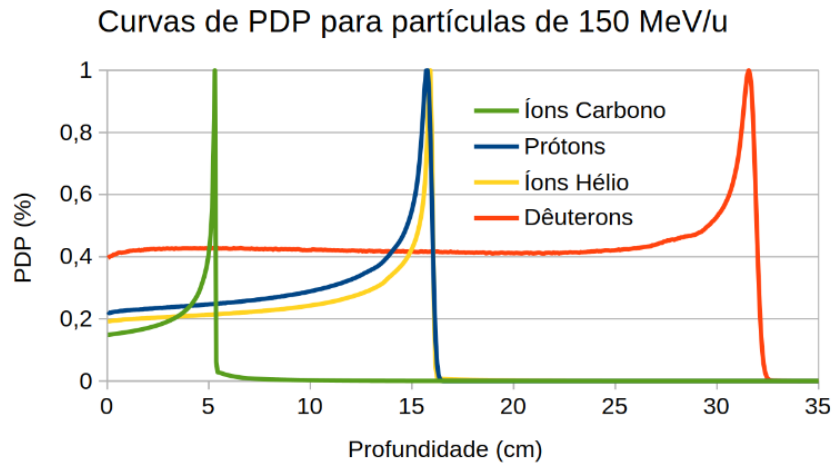


Figura 30 – Curvas de PDP para prótons, dêutrons, íons Hélio e íons Carbono, todos com 150 MeV/u. As curvas foram normalizadas para 100% na dose máxima. Fonte: O autor.

Visualmente, as previsões fornecidas pela equação (2.14) foram boas aproximações aos alcances simulados. Para uma análise numérica, a Tabela 3 mostra a profundidade do pico de Bragg, R_{CSDA} , para cada partícula, comparando-as com o alcance esperado, R_e , em relação ao feixe de prótons. Para prótons e íons Hélio, os alcances das tabelas PSTAR e ASTAR, R_{STAR} , foram incluídos.

Tabela 3 – Alcances obtidos nas simulações, seus alcances esperados em relação ao alcance dos prótons e, para prótons e íons Hélio, alcances tabelados.

Partícula	T (MeV)	R_{CSDA} (cm)	R_e (cm)	R_{STAR}
$^1H^+$	150	$15,767 \pm 0,033$	-	15,77
$^2H^+$	300	$31,567 \pm 0,033$	31,54	-
$^4He^{2+}$	600	$15,900 \pm 0,033$	15,77	15,86
$^{12}C^{6+}$	1800	$5,300 \pm 0,033$	5,26	-

Fonte: O autor.

A maior diferença entre previsão e simulação aconteceu com íons Hélio. Um teste Z mostra uma diferença em até 2,6 desvios padrões entre os alcances previsto e simulado para esse tamanho de voxel. Com isso, não podemos rejeitar a hipótese de que os valores são iguais com um nível de significância de 0,1%.

5 CONCLUSÃO

Simulações de Monte Carlo podem ser úteis para o aprendizado de Física das Radiações nas universidades. É preciso, contudo, que as simulações sejam validadas para podermos confiar em seus resultados. Muitas vezes, como foi o caso para a validação de feixes de partículas alfa, uma mudança simples nos módulos de física usados pode resultar em uma melhor aproximação a valores teóricos ou experimentais.

A fundamentação teórica buscou atender o objetivo do trabalho de servir de base para o uso de simulações de Física das Radiações usando o TOPAS MC. As simulações propostas buscaram atender o objetivo do trabalho de considerar aspectos importantes da física de partículas carregadas pesadas.

Alcances de feixes de íons ${}^4\text{He}^{2+}$ de 50 MeV a 800 MeV foram validados no TOPAS a partir de valores tabelados pelo NIST (NIST...) para os módulos de física utilizados. A física adaptada propôs a inclusão de uma biblioteca de seções de choque à física padrão do TOPAS. Para a faixa de energia testada, a diferença foi suficiente para haver ótima concordância entre os alcances simulados e os tabelados.

Feixes de íons ${}^{12}\text{C}^{6+}$ com energias de 195 MeV/u a 400 MeV/u foram validados no TOPAS. A validação foi feita com base em uma validação prévia do GEANT4, fazendo uso dos mesmos dados experimentais. Os resultados foram satisfatórios, havendo boa concordância entre os pontos experimentais e os valores das simulações.

A primeira simulação didática foi capaz de mostrar a influência da heterogeneidade no alcance das partículas. Apesar de as simulações terem sido realizadas com uma fina espessura de osso, houve uma diferença considerável no alcance dos feixes em água.

A segunda simulação didática foi capaz de mostrar uma forma simples de estimar o alcance de um feixe de partículas carregadas pesadas. A concordância entre alcance estimado e simulado para íons Hélio não foi tão boa como para dêuterons e íons Carbono. É importante ressaltar que a equação 2.14 deve ser usada apenas como estimativa, dado que sua simplicidade reduz sua precisão.

6 PERSPECTIVAS FUTURAS

O TOPAS MC ainda pode ser melhor explorado, seja para fins de pesquisa ou como ferramenta didática. Simulações didáticas futuras podem incluir:

- outros tipos de heterogeneidade, como tecido pulmonar, de espessuras diferentes para verificar a influência de heterogeneidade, ou
- outras partículas, como íons Oxigênio, em outras faixas energéticas para avaliar as diferenças de deposição de dose no meio, ou
- o uso de pacientes em formato DICOM, para estudar métodos de planejamento de Radioterapia com prótons.

REFERÊNCIAS

- ANDREO, P. et al. **Fundamentals of Ionizing Radiation Dosimetry**. [S.l.]: Wiley-VCH, 2017.
- ATTIX, F. **Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1986.
- FADDEGON, B. et al. The topas tool for particle simulation, a monte carlo simulation tool for physics, biology and clinical research. **Physica Medica**, v. 72, p. 114–121, 2020.
- GEANT4 COLLABORATION. Electromagnetic physics constructors, EM DNA. PhysicsListGuide, Geant4 user documentation 11.2 (doc Rev8.0). Disponível em: <https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/PhysicsListGuide/html/index.html>. Último acesso: 30 de Out. 2024.
- HAETTNER, E.; IWASE, H.; SCHARDT, D. Experimental fragmentation studies with 12c therapy beams. **Radiation Protection Dosimetry**, v. 122, n. 1-4, p. 485–487, 2006.
- INCERTI, S. et al. Geant4-dna example applications for track structure simulations in liquid water: A report from the geant4-dna project. **Medical Physics**, v. 45, n. 8, 2013.
- KALOS, M.; WHITLOCK, P. **Monte Carlo Methods**. [S.l.]: Wiley-VCH, 2008.
- LECHNER, A.; INVANCHENKO, V.; KNOBLOCH, J. Validation of recent geant4 physics models for application in carbon ion therapy. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms**, v. 268, n. 14, p. 2343–2354, 2010.
- NETO, R. et al. Simulações de experimentos didáticos em física médica com topas mc. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 45, 2023.
- NIST. PSTAR, stopping-power and range tables for protons and ASTAR, stopping-power and range tables for helium ions. Disponíveis em: <https://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/PSTAR.html>. <https://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/ASTAR.html>. Último acesso: 9 de Out. de 2024.
- PERL, J. et al. An innovative proton monte carlo platform for research and clinical applications. **Medical Physics**, v. 39, n. 11, 2012.
- PLOTDIGITIZER, 3.1.6, 2024. Disponível em: <https://plotdigitizer.com/app>. Último acesso: 20 de Nov. de 2024.
- ROSA, A. et al. Radiotherapy resources in brazil (rt2030): a comprehensive analysis and projections for 2030. **Lancet Oncology**, v. 24, n. 8, p. 903–912, 2023.
- SIHVER, L.; SCHARDT, D.; KANAI, T. Depth-dose distributions of high-energy carbon, oxygen and neon beams in water. **Med. Phys.**, v. 18, n. 1, 1998.

SOUZA, F. Protonterapia: avaliação de dose absorvida de nêutrons nas técnicas de espalhamento duplo passivo convencional e flash. **Trabalho de Conclusão de Curso**, 2022.

TESTA, M. et al. Experimental validation of the topas monte carlo system for passive scattering proton therapy. **Medical Physics**, v. 40, n. 12, 2018.

TOPAS COLLABORATION. TOPAS Read the Docs. Disponível em: <https://topas.readthedocs.io/en/latest/>. Último acesso: 3 de Dez. de 2024.

TURNER, J. **Atoms, Radiation, and Radiation Protection**. [S.l.]: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., 2007.

VASCONCELOS, T. Repositório GitHub. Disponível em: <https://github.com/tsvas/tcc>.