

Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”
Instituto de Biociências – Câmpus de Botucatu

**MODELOS DE TRAÇOS APLICADOS AO CÁLCULO DA EFICIÊNCIA DE
PRODUÇÃO DE RADICAIS LIVRES PRODUZIDOS POR PARTÍCULAS
CARREGADAS EM ÁGUA**

Beatriz Moreira Magiore

Botucatu
2022

Beatriz Moreira Magiore

**MODELOS DE TRAÇOS APLICADOS AO CÁLCULO DA EFICIÊNCIA DE
PRODUÇÃO DE RADICAIS LIVRES PRODUZIDOS POR PARTÍCULAS
CARREGADAS EM ÁGUA**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Física Médica da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Bacharel em Física Médica.

Orientador: Professor Doutor Joel Mesa Hormaza

Botucatu
2022

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA SEÇÃO TÉC. AQUIS. TRATAMENTO DA INFORM.
DIVISÃO TÉCNICA DE BIBLIOTECA E DOCUMENTAÇÃO - CÂMPUS DE BOTUCATU - UNESP
BIBLIOTECÁRIA RESPONSÁVEL: ROSEMEIRE APARECIDA VICENTE-CRB 8/5651

Magiore, Beatriz Moreira.

Modelos de traços aplicados ao cálculo da eficiência da produção de radicais livres produzidos por partículas carregadas em água / Beatriz Moreira Magiore. - Botucatu, 2022

Trabalho de conclusão de curso (bacharelado - Física Médica) - Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", Instituto de Biociências de Botucatu
Orientador: Joel Mesa Hormaza
Capes: 10500006

1. Ionização. 2. Traços de partícula (Física nuclear).
3. Elétrons. 4. Radicais livres (Química).

Palavras-chave: Eficiência de ionização; Elétrons secundários; Formulação dielétrica; Modelos de traço.

Beatriz Moreira Magiore

**MODELOS DE TRAÇOS APLICADOS AO CÁLCULO DA EFICIÊNCIA DE
PRODUÇÃO DE RADICAIS LIVRES PRODUZIDOS POR PARTÍCULAS
CARREGADAS EM ÁGUA**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Física Médica da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Bacharel em Física Médica.

Comissão examinadora:

Professor Doutor Joel Mesa Hormaza
Orientador

Professor Doutor Luis Antonio Justulin Junior
Examinador

Professor Doutor Paulo Fernando de Arruda Mancera
Examinador

Agradecimentos

A meus pais, avós e irmão por todo amor, cuidado, carinho, incentivo e suporte em todos os momentos de minha vida, que são minha base e me permitem viver essa experiência tão engrandecedora. A todos meus familiares que, de perto ou longe, sempre estiveram presentes em minha vida e contribuíram para meu crescimento.

Aos meus avós, familiares e amigos que já partiram deste plano, os quais levo com muito amor e saudade em meu coração e em minhas memórias e que tenho certeza de que me guardam de onde quer que estejam.

A todos meus professores do Colégio São Francisco que, desde o Ensino Fundamental e Médio, contribuíram na minha educação e formação pessoal e profissional. Principalmente, à minha mãe, minha primeira e principal professora, que “plantou a semente” das ciências exatas em minha vida. Em especial, ao Guilherme, meu professor de física que sempre me incentivou, ensinou e deu o pontapé para minha escolha de curso no vestibular.

Às minhas amigas de infância por toda a parceria e amizade, que continuaram a estar presentes, mesmo a quilômetros de distância. Aos amigos que encontrei durante a graduação, com quem pude dividir os fardos, as angústias e as alegrias dessa fase. Às amigas “virtuais” que construí nestes últimos anos, que foram essenciais durante este período turbulento e que continuam ao meu lado.

Ao professor Joel, que me recebeu com muito carinho e muito me ensinou em todos estes anos sob sua orientação, pela confiança e por todo incentivo e suporte ao longo de minha iniciação científica e pela parceria, que está só no começo e ainda irá trazer muitos frutos.

Ao Centro de Isótopos Estáveis e ao Departamento de Biofísica e Farmacologia por todo o suporte para a realização do projeto. Aos colegas, Jonathan, Victoria e Guilherme, do Núcleo de Estudos de Radiologia e Dosimetria por Simulação (NERDS), que trabalharam conjuntamente neste projeto. E a todos os professores do curso de Física Médica, responsáveis pela minha formação profissional.

Ao apoio financeiro da PIBIC/Reitoria durante a realização deste projeto.

Resumo

Foi utilizada a formulação dielétrica na aproximação MELF-GOS para o cálculo de largura de traços produzidos por prótons e partículas α em alvos de água líquida. Os alcances dos elétrons secundários obtidos a partir dos seus espectros serviram para estimar a largura dos traços. Este resultado foi comparado com os modelos de Katz, Geiss, Scholz e Tabata, mostrando concordância com eles. Adicionalmente, foi calculada a eficiência de ionização para os diferentes estados de carga dos dois tipos de feixes, considerando que os elétrons são todos produzidos na direção perpendicular ao feixe iônico e que eles se propagam instantaneamente. Para as duas partículas, foi identificada uma região de máxima produção de ionizações a uma distância de aproximadamente 3\AA do feixe. Também foi obtido um pico para energias de $\sim 0,1$ MeV e $\sim 0,2$ MeV, para prótons e partículas α , respectivamente.

Palavras-chave: Formulação dielétrica; Elétrons secundários; Modelos de traço; Eficiência de ionização.

Abstract

The dielectric formulation in the MELF-GOS approximation was used to calculate the width of tracks produced by protons and α -particles in liquid water targets. The ranges of secondary electrons obtained from their spectra were used to estimate the width of the tracks. This result was compared with the models of Katz, Geiss, Scholz and Tabata, showing agreement with them. Additionally, the ionization efficiency was calculated for the different states of charge of the two types of beams, considering that the electrons are all produced perpendicularly to the ion beam and that they propagate instantaneously. For both particles, a region of maximum ionization production was identified at approximately 3\AA from the beam. A peak was also obtained for energies of $\sim 0.1\text{ MeV}$ and $\sim 0.2\text{ MeV}$, for protons and α -particles, respectively.

Keywords: Dielectric formalism; Secondary electrons; Track structure; Ionization efficiency.

Lista de figuras

Figura 1 – Diagramas de quebras simples e duplas do DNA causadas pela radiação. . .	12
Figura 2 – Distribuição de dose por profundidade de um feixe de fótons monoenergético (azul) e um feixe de prótons monoenergético (laranja), com ponto de entrada à esquerda.	13
Figura 3 – (a) Comparação entre curvas de deposição de dose por profundidade de fótons e prótons. (b) Seção de corte de dose por profundidade para SOBP e feixe de raios-x.	14
Figura 4 – Inverso do livre caminho médio como função da energia da partícula incidente.	21
Figura 5 – Poder de freamento como função da energia da partícula incidente.	22
Figura 6 – Energia média transferida como função da energia da partícula incidente. . .	22
Figura 7 – Probabilidade de transferência de energia de próton para elétrons secundários em água.	23
Figura 8 – Probabilidade de transferência de energia de partículas α para elétrons secundários em água.	24
Figura 9 – Alcance de elétrons calculado na água.	24
Figura 10 – Faixa de penetração de elétrons secundários produzidos por prótons. Estão representados os resultados das parametrizações Katz, Geiss, Tabata e Scholz.	25
Figura 11 – Faixa de penetração de elétrons secundários produzidos por partículas α . Estão representados os resultados das parametrizações Katz, Geiss, Tabata e Scholz.	26
Figura 12 – Eficiência de ionização em função da energia dos elétrons.	27
Figura 13 – Eficiência de ionização em função da energia do próton e da distância radial.	28
Figura 14 – Eficiência de ionização em função da energia da partícula α e da distância radial.	29

Lista de abreviaturas e siglas

DNA	Ácido Desoxirribonucleico
DSB	<i>Double Strand Break</i>
LET	<i>Linear Energy Transfer</i>
MELF-GOS	<i>Mermin Energy Loss Function – Generalized Oscillator Strength</i>
RBE	<i>Relative Biological Effectiveness</i>
SOBP	<i>Spread-out Bragg Peak</i>
SSB	<i>Single Strand Break</i>

Sumário

1	Introdução	11
2	Objetivos	15
3	Fundamentação teórica	16
3.1	Formalismo dielétrico	16
3.2	Modelo de Traços	19
3.3	Eficiência de ionização	19
4	Metodologia	20
4.1	Mathcad	20
4.2	Libamtrack	20
4.2.1	Katz	20
4.2.2	Geiss	20
4.2.3	Tabata	20
4.2.4	Scholz	20
5	Resultados e Discussão	21
6	Conclusão	31
	Referências	32

1 Introdução

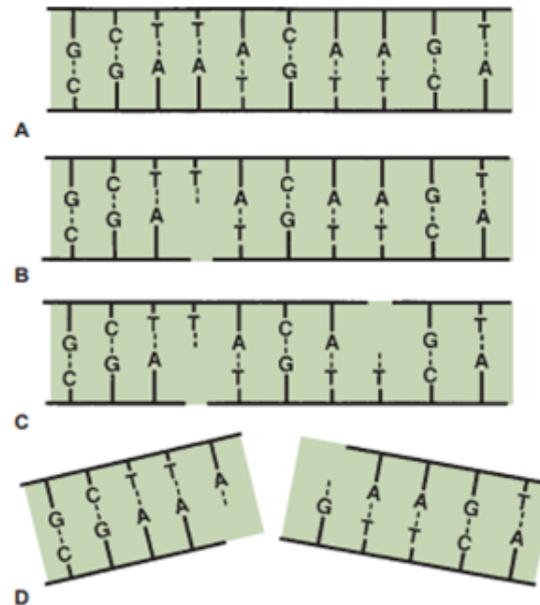
Ao ser absorvida por um material biológico, a radiação pode causar excitação ou ionização. A excitação ocorre quando a energia absorvida é tal que um elétron em um átomo ou molécula transita para um nível de energia maior sem que seja ejetado. Por outro lado, quando a radiação tem energia maior ou igual ao necessário para ejetar um ou mais elétrons orbitais de um átomo ou molécula, o processo é, então, chamado de ionização e a radiação é dita ionizante (HALL, 2012). Usualmente, a radiação ionizante pode ser classificada como eletromagnética, como é o caso dos raios-x e gama, ou corpuscular, como elétrons, prótons, nêutrons, partículas α e outras partículas pesadas carregadas.

A radiação pode ser classificada como direta ou indiretamente ionizante. As partículas carregadas são consideradas diretamente ionizantes, pois têm energia suficiente para quebrar a estrutura atômica de moléculas importantes, como o DNA. Já a radiação eletromagnética é considerada indiretamente ionizante, pois, ela própria, não é capaz de causar tais alterações, mas ao ser absorvida pela matéria biológica, sua energia quebra moléculas de água do meio, produzindo partículas carregadas com movimento (chamados radicais livres) que são capazes de produzir danos (HALL, 2012).

O DNA, como já conhecido, é uma molécula grande que possui uma estrutura helicoidal que consiste em duas fitas de bases nitrogenadas ligadas por pontes de hidrogênio. A radiação induz um grande número de lesões no DNA, sendo que a maioria é possível de ser reparada pela célula. Tais lesões podem ser classificadas como quebras simples (SSB – *Single Strand Break*) ou como quebras duplas (DSB – *Double Strand Break*) (HALL, 2012).

Em termos de morte celular, as SSBs são de baixa consequência biológica, pois são facilmente reparadas utilizando a fita oposta como modelo (Figura 1B). Caso o reparo tenha sido incorreto, pode resultar em uma mutação. Se as duas fitas do DNA são quebradas, mas as lesões são bem separadas, o reparo ocorre da mesma forma, pois são consideradas duas SSBs separadas (Figura 1C). Por outro lado, se duas quebras ocorrem em fitas opostas e separadas por poucos pares de base, isso, então, configura uma DSB, resultando na separação da cromatina em duas partes (Figura 1D). As DSBs são consideradas as lesões mais importantes produzidas pela radiação nos cromossomos, podendo resultar em morte celular, carcinogênese ou mutações. Tanto os radicais livres quanto as ionizações diretas podem causar a formação de DSBs (HALL, 2012).

Figura 1 – Diagramas de quebras simples e duplas do DNA causadas pela radiação.

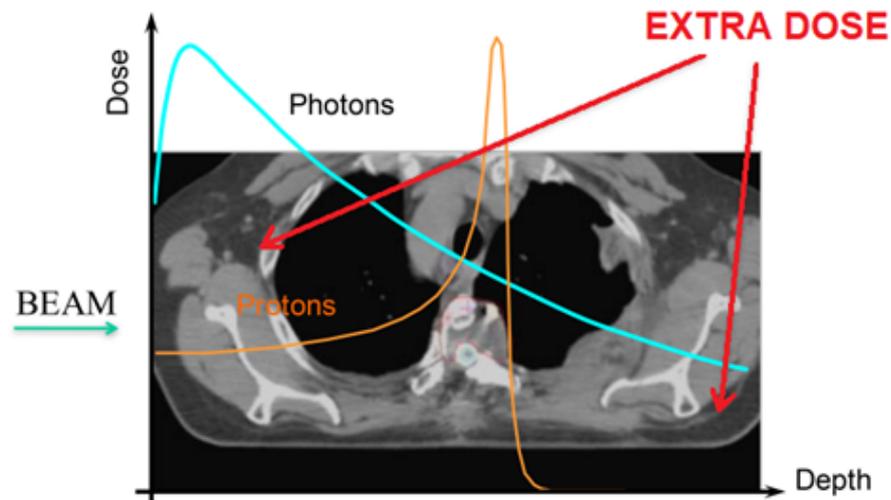


A: Representação bidimensional de uma hélice normal de DNA. **B:** Uma quebra em uma única fita é de baixa significância, pois pode ser reparada utilizando a fita oposta como modelo. **C:** Quebras em ambas as fitas, quando bem separadas, são reparadas como quebras independentes. **D:** Se as quebras ocorrem em ambas as fitas e são diretamente opostas ou separadas por poucos pares de base, pode causar uma DSB em que o cromossomo se divide em duas partes.

Fonte: (HALL, 2012)

Os fótons, comumente utilizados na Radioterapia Convencional, depositam a dose indiretamente por meio de elétrons secundários que são produzidos pela ionização do meio. A distribuição de dose dos fótons em função da profundidade mostram um máximo próximo à entrada e, então, um decrescimento exponencial de deposição de energia conforme o aumento da profundidade no tecido, sem um alcance finito. Já as partículas carregadas, como os elétrons, prótons e outros íons pesados, possuem um alcance finito quando interagem com um material. Os elétrons apresentam espalhamento significativo e resultam em uma distribuição de dose difusa. Por outro lado, os prótons sofrem espalhamento de pequeno ângulo e depositam a energia máxima por comprimento percorrido próximo ao final de seu alcance, gerando o chamado pico de Bragg (PAGANETTI, 2017).

Figura 2 – Distribuição de dose por profundidade de um feixe de fótons monoenergético (azul) e um feixe de prótons monoenergético (laranja), com ponto de entrada à esquerda.

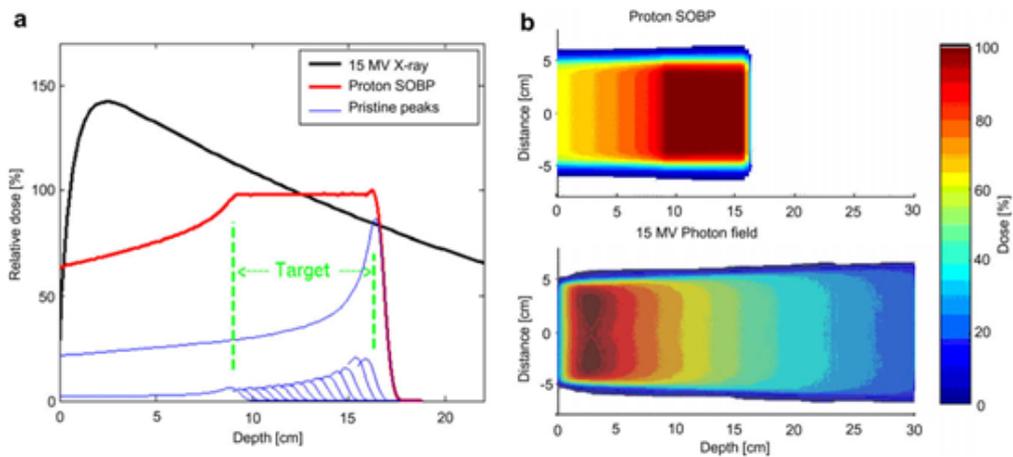


Fonte: (PAGANETTI, 2017)

O pico de Bragg é resultado da transferência de energia em interações eletromagnéticas ser inversamente proporcional à velocidade do projétil, ou seja, conforme os prótons desaceleram, eles perdem mais energia por comprimento percorrido. Isso causa um aumento da energia absorvida no tecido por unidade de comprimento, conhecida por LET (*Linear Energy Transfer*). A intensidade do feixe, isto é, o número de prótons primários, diminui com a profundidade pois eles param uma vez que depositam toda sua energia ou sofrem interações nucleares (PAGANETTI, 2017).

Devido à ausência de dose de saída e à energia variável do feixe que determina a profundidade da posição do pico de Bragg, os prótons oferecem mais opções para a construção da distribuição de dose quando comparados com os fótons. Um arranjo de feixes de prótons monoenergéticos de energias graduadas é projetado de forma que se alcance uma dose relativamente uniforme ao longo do volume de interesse. Essa região de dose uniforme é chamada de SOBP, *Spread-Out Bragg Peak*, como mostrado na Figura 3.

Figura 3 – (a) Comparação entre curvas de deposição de dose por profundidade de fótons e prótons. (b) Seção de corte de dose por profundidade para SOBP e feixe de raios-x.



Fonte: (SUIT et al., 2010)

A água líquida tem sido utilizada como um material substituto para descrever diferentes tecidos biológicos, porque a maioria apresenta características gerais semelhantes em seu espectro de excitação. Contudo, os espectros de excitação dos principais constituintes celulares mostram pequenas diferenças (SUN et al., 1995). Este fato impacta sobre a forma como a energia é depositada pelo projétil e a consequente geração de elétrons secundários (δ -elétrons). Além disso, o tamanho e a geometria dos compartimentos subcelulares também influenciará a forma como eles absorvem a energia depositada pelo projétil, já que os elétrons secundários podem transportar energia para diferentes partes da célula.

Existem vários trabalhos relacionados com estudos da interação de feixes de íons energéticos (principalmente prótons) com água em energias intermediárias. Esses estudos são importantes para a compreensão radiobiológica da interação de feixes iônicos com a matéria viva, porque mais de 80% das células de tecidos moles são compostas de água (DINGFELDER et al., 2000; EMFIETZOGLOU et al., 2003; GARCIA-MOLINA et al., 2009).

Para isso, aplicamos o formalismo dielétrico (ABRIL et al., 1998) para a perda de energia de projéteis rápidos na matéria. O espectro de excitação dos elétrons do alvo foi incluído através de uma combinação de funções de perda de energia segundo o formalismo de Mermin para descrever as excitações de elétrons de camadas externas e das funções de força do oscilador generalizadas para as excitações atômicas de elétrons de camadas internas (MERMING, 1970). A confiabilidade deste chamado método de cálculo da função de perda de energia pelo modelo de Mermin combinado com o cálculo das funções de força do oscilador generalizadas (MELF-GOS – *Mermin Energy Loss Function – Generalized Oscillator Strength Method*) já foi verificada por outros autores na descrição de colisões atômicas com sólidos, para alvos elementares ou compostos e para feixes de íons leves com energias cobrindo um amplo espectro (ABRIL et al., 1998; HEREDIA-AVALOS et al., 2005; DE VERA et al., 2013).

2 Objetivos

Utilizar a formulação dielétrica na aproximação MELF-GOS para o cálculo de largura de traços produzidos por prótons e partículas α em alvos de água líquida, através do cálculo do alcance de elétrons secundários, a fim de comparação com as parametrizações de Katz, Geiss, Scholz e Tabata. Bem como, calcular a eficiência de ionização para os diferentes estados de carga dos dois tipos de feixes para identificar a região de máxima produção de ionizações.

3 Fundamentação teórica

Foi utilizada a formulação dielétrica na aproximação MELF-GOS para o cálculo da largura de traços de prótons e partículas α em água líquida.

3.1 Formalismo dielétrico

O formalismo dielétrico (LINDHARD, 1954), fornece expressões para calcular os três momentos estatísticos da distribuição de perda de energia de uma partícula energética que interage com um meio material:

$$\frac{2}{\hbar\pi\nu^2} \int_0^\infty dk \frac{[\rho_q(k)]^2}{k} \int_0^{k\nu} (\hbar\omega)^n \text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon(k, \omega)} \right] d\omega = \begin{cases} \lambda^{-1} & , n = 0 \\ S & , n = 1 \\ \Omega^2 & , n = 2 \end{cases} \quad (3.1)$$

em que ν é a velocidade do projétil, $\hbar\omega$ e $\hbar k$ são, respectivamente, a energia e o momento transferidos em uma colisão inelástica, $\rho_q(k)$ é a transformada de Fourier da densidade eletrônica de um estado de carga q do projétil, $\text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon(k, \omega)} \right]$ é a função de perda de energia do alvo, ELF (*Energy Loss Function*), e $\varepsilon(k, \omega)$ é a função dielétrica.

Na equação (3.1), o momento zero ($n = 0$) corresponde ao inverso do livre caminho médio inelástico, λ^{-1} , sendo o livre caminho médio inelástico de um elétron, a distância média percorrida entre duas colisões inelásticas sucessivas de um elétron se movendo com certa energia em um dado material (DA et al., 2014). Já o primeiro momento ($n = 1$), é a perda média de energia por unidade de distância percorrida, que coincide com o poder de freamento, *stopping power*, S , da partícula (ABRIL et al., 1998). As flutuações estocásticas na perda de energia pelo projétil são consideradas pelo segundo momento ($n = 2$), que define a dispersão na perda de energia, o *straggling*, Ω^2 , relacionado à variância da perda de energia por unidade de percurso.

O estado de carga q de um projétil, com o número atômico Z_1 , e que se movimentava através de um meio condensado, pode variar devido a processos de captura e perda de elétrons. Desta forma, para energias de projéteis baixas e intermediárias, esses processos de troca dinâmica de carga acontecem de forma contínua ao longo do caminho do projétil através do alvo, afetando a forma como perde de energia.

Quando o equilíbrio de carga é atingido, geralmente ~ 10 - 13 s após o projétil começar a penetrar o alvo, as magnitudes associadas com a perda de energia podem ser obtidas a partir de uma soma ponderada pelo correspondente estado de carga q :

$$\begin{aligned}
\Lambda_p(E) &= \sum_{q=0}^{Z_1} \varphi_q(E) \cdot \lambda_q^{-1}(E) \\
S_p(E) &= \sum_{q=0}^{Z_1} \varphi_q(E) \cdot S_q(E) \quad , \\
\Omega^2(E) &= \sum_{q=0}^{Z_1} \varphi_q(E) \cdot \Omega_q^2(E)
\end{aligned} \tag{3.2}$$

em que $\varphi_q(E)$ é a probabilidade de encontrar o projétil com uma determinada carga q na energia E . As somas nas equações anteriores estendem-se sobre todos os possíveis estados de carga q do projétil. No equilíbrio, assumimos as frações de estado de carga como dependentes da natureza do alvo, do tipo de projétil e da sua energia.

O cálculo da ELF é baseado no uso de funções dielétricas de Mermin (MERMIN, 1970) para a descrição das excitações de elétrons de camadas externas, combinadas com forças de oscilador generalizadas obtidas a partir de funções de onda hidrogenoides (FRIEDLAND et al., 2003; INOKUTI, 1971) para a descrição das excitações dos elétrons de camadas internas. Devido a diferente resposta que a perturbação induzida pelo projétil provoca nos elétrons mais fracamente ligados de camadas exteriores e nos elétrons de camadas internas, a descrição de ambas as contribuições para a ELF pode ser estabelecida de forma independente. Portanto, a ELF pode ser dividida em duas componentes:

$$\text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon(k, \omega)} \right] = \text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon(k, \omega)} \right]_{int} + \text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon(k, \omega)} \right]_{ext} \quad , \tag{3.3}$$

Para a densidade de carga do projétil no espaço de momentos, adotamos o modelo estatístico proposto por Brandt e Kitagawa (BK) (BRANDT, 1982). Já as frações de carga foram calculadas, empregando a formulação de Schiwietz-Grande (SCHIWIEZ; GRANDE, 2001), implementada no código CasP (SCHIWIEZ; GRANDE, 2012).

Na interação da radiação ionizante de alta energia (raios-x ou γ , elétrons acelerados ou partículas carregadas mais pesadas) na matéria, elétrons de baixa energia (denominados coletivamente “elétrons secundários”) desempenham um papel crucial, em parte porque esses elétrons são componentes frequentes de tais radiações e em também porque sua faixa de penetração serve para definir a geometria do traço de radiação.

Chamaremos aqui de “alcance” o comprimento do vetor $\vec{R}_f - \vec{R}_i$, do ponto de partida (\vec{R}_i) para a posição final (\vec{R}_f) do elétron após termalização. Ele difere do “intervalo” (também geralmente chamado de “*pathlength*”), que é usualmente definido como o comprimento do caminho tortuoso do elétron para a degradação completa da energia em energia térmica. Do ponto de vista da “química da radiação”, a avaliação das faixas de penetração de elétrons secundários é necessária, por exemplo, para determinar taxa de produção de radicais livres em líquidos

dielétricos irradiados, o tamanho do “traço” químico de radiação inicial para a modelagem da radiólise de líquidos, e a extensão em que os elétrons de baixa energia, colocados em movimento ao redor dos rastros de radiação, induzem danos diretos ao DNA de uma célula viva.

Para avaliar os possíveis danos induzidos em materiais biológicos devido à irradiação com partículas energéticas, outra magnitude a ser considerada é a média de energia transferida por um projétil de energia E para o alvo em que produz excitações e ionizações eletrônicas, $W_{med}(E)$. Esta magnitude é definida por:

$$W_{med}(E) = \frac{S(E)}{\Lambda(E)} = \frac{\sum_{q=0}^{Z_1} \varphi_q(E) \cdot S_q(E)}{\sum_{q=0}^{Z_1} \varphi_q(E) \cdot \lambda_q^{-1}(E)}, \quad (3.4)$$

em que $\varphi_q(E)$ é a probabilidade de encontrar o projétil com uma determinada carga q na energia E , $S(E)$ é o poder de freamento e $\Lambda(E)$ é o inverso do caminho livre médio de colisão inelástica.

Adicionalmente, e baseado na teoria de perturbação de primeira ordem (aproximação de onda plana de Born, PWBA), o formalismo dielétrico fornece a seguinte expressão para a probabilidade $P_q(E, \omega)$ de que a partícula com carga q e energia E transfira uma energia $\hbar\omega$, por unidade de comprimento do caminho percorrido, através de um processo inelástico (isto é, excitações de elétrons individuais e coletivos, bem como ionizações) para qualquer valor possível de transferência de momento $\hbar k$ (DE VERA et al., 2013):

$$P_q(E, \omega) = \frac{d}{d\omega dk} \Lambda(E, \omega) = \frac{Mq_e^2}{\hbar\pi E} \int_{k_{min}}^{\infty} \frac{dk}{k} [\rho_q(k)]^2 \text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon(k, \omega)} \right], \quad (3.5)$$

em que $k_{min} = \omega/\sqrt{2E/M}$ e q_e é o valor absoluto da carga do elétron.

Baseados no poder de freamento, S , do elétron, implementado na formulação dielétrica:

$$S(E) = \frac{m_e q_e^2}{\pi E} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} \int_0^{\hbar k \sqrt{2E/m_e}} (\hbar\omega) \text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon(k, \omega)} \right] d\omega, \quad (3.6)$$

pode ser calculado o alcance dos elétrons:

$$R(E) = \int_0^E \frac{dE}{S(E)}. \quad (3.7)$$

3.2 Modelo de Traços

A teoria de estrutura de traços foi desenvolvida por Robert Katz e colaboradores há cerca de 50 anos (KATZ et al., 1971) e é um modelo paramétrico fenomenológico capaz de descrever quantitativamente e prever a resposta de detectores físicos e biológicos após irradiação de íons (KORCYL, 2012). Katz foi o primeiro a mostrar a importância da estrutura de traços na análise da resposta de sistemas biológicos após irradiação com íons energéticos – radiação de alto LET (KATZ et al., 1971).

Modelos de traços são baseados na suposição de que o efeito da radiação de um íon energético pesado se deve a δ -elétrons em torno da trajetória do íon e que a deposição de energia ao redor da trajetória da partícula pode ser descrita por um perfil de dose radial média contínuo (HERRMANN, 2012).

Por ser uma teoria baseada em parametrizações, existem diversos modelos para derivação de fórmulas para dose radial e alcance de elétrons, cada um com suas particularidades (KATZ et al., 1971; TABATA et al., 1972; ZHANG et al., 1975; WALIGÓRSKI et al., 1986; CUCINOTTA et al., 1997).

3.3 Eficiência de ionização

Para a água líquida, o valor W_e descreve a energia média necessária para produzir uma ionização (PIMBLOTTI; MOZUMDER, 1991) e pode ser obtido através da equação:

$$W_e = \frac{E \cdot W_\infty}{(E - U)}, \quad (3.8)$$

em que W_∞ é o valor limite para elétrons de alta energia, definido como 20,8 eV e U é igual ao potencial de ionização da água líquida, $U = 8,3$ eV. Essa equação foi originalmente derivada por Inokuti para descrever o valor W_e para gases sob irradiação por elétrons. (INOKUTI, 1975)

A partir da energia média de ionização, a eficiência de ionização é, então, dada pela equação:

$$G_e = \frac{100 \cdot (1 - U/E)}{W_e}, \quad (3.9)$$

4 Metodologia

4.1 Mathcad

As equações do formalismo dielétrico e de eficiência de ionização foram implementadas no *software* de manipulação algébrica, Mathcad PTC 14.0.

4.2 Libamtrack

O projeto Libamtrack (GREILICH et al., 2010) consiste de uma biblioteca de códigos com a intenção de facilitar a aplicação e comparação numérica de diferentes modelos de traço. Neste trabalho utilizamos o submodelo de alcance de elétrons, que determina o comprimento do traço de uma partícula. Os dados foram adquiridos através da seção “Track Structure” e subseção “Delta-electron range vs. Ion energy” para as parametrizações de Katz, Geiss, Tabata e Scholz.

As expressões para alcance de elétrons implementadas no Libamtrack foram:

4.2.1 Katz

$$r_{\max}/(\text{g} \cdot \text{cm}^{-2}) = 10^{-6} \omega/\text{keV}, \omega/\text{keV} = 2 \cdot m_e \cdot \left(\frac{E}{E_0}\right)^2 + 2 \left(\frac{E}{E_0}\right) \quad (4.1)$$

4.2.2 Geiss

$$r_{\max}(\text{cm}) = 4 \cdot 10^{-5} (E/\text{MeV})^{1.5} \frac{\rho_{\text{material}}}{\rho_{\text{water}}} \quad (4.2)$$

4.2.3 Tabata

$$r_{\max} = a_1 \left[1/a_2 \ln(1 + a_2 \omega/mc^2) - \frac{a_3 \omega/mc^2}{1 + a_4 (\omega/mc^2)^{a_5}} \right] \quad (4.3)$$

$$a_1 = b_1 A/Z^{b_2}, a_2 = b_3 Z, a_3 = b_4 - b_5 Z, a_4 = b_6 - b_7 Z, a_5 = b_8/Z^{b_9}$$

em que b_i são constantes dependentes do material onde o alcance está sendo calculado.

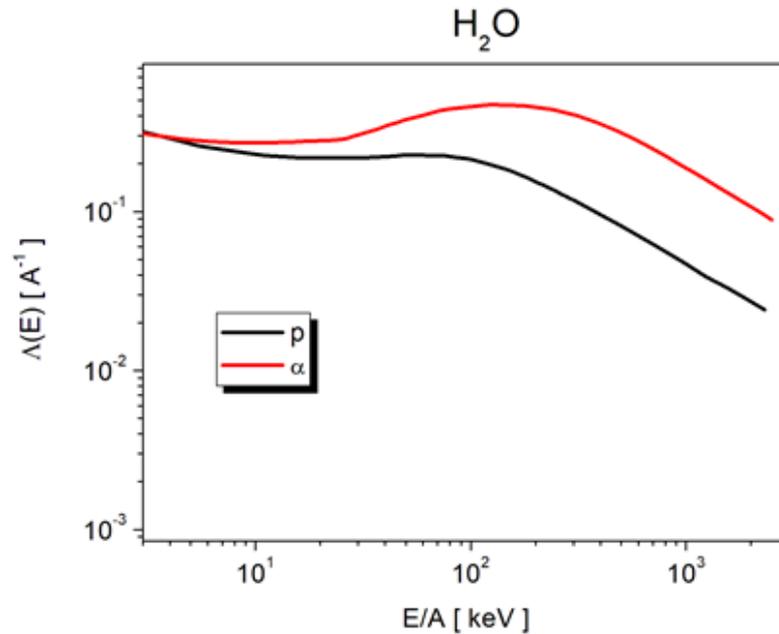
4.2.4 Scholz

$$r_{\max}(\mu \text{ m}) = 0.05 \cdot 10^{-5} (E/\text{MeV})^{1.7} \frac{\rho_{\text{material}}}{\rho_{\text{water}}} \quad (4.4)$$

5 Resultados e Discussão

O inverso do livre caminho médio, $\Lambda_p(E)$, e o poder de freamento, S , obtidos pelo formalismo dielétrico através das equações (3.1) e (3.2) foram calculados para prótons e partículas α , em função de E/A , e são apresentados nas Figuras 4 e 5, respectivamente.

Figura 4 – Inverso do livre caminho médio como função da energia da partícula incidente.

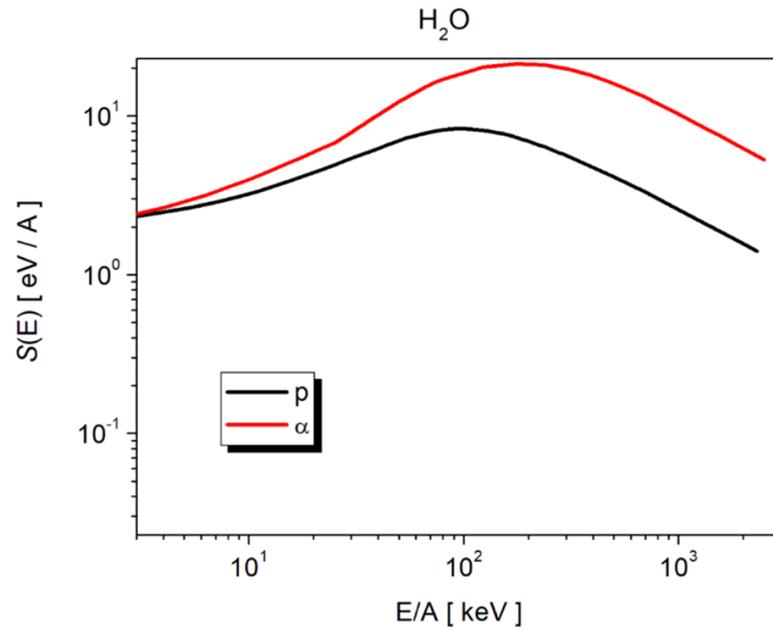


Fonte: a autora

Normalmente, o $\Lambda_p(E)$ é requerido como dado básico de entrada em simulações Monte Carlo, para contabilizar as interações eletrônicas e avaliar os danos em tecido biológico pela irradiação com partículas carregadas energéticas. Neste caso, foi utilizado para o cálculo da energia média transferida por um projétil de energia E para o alvo em que produz excitações e ionizações eletrônicas.

Os valores máximos de S , mostrados na Figura 5, estão em torno de 100 keV/nucleon para feixes de prótons e 120 keV/nucleon para feixes de partículas α . Essas energias também correspondem à probabilidade máxima de excitar elétrons no alvo. Em baixas energias do projétil (ao redor e abaixo do máximo do poder de freamento) os processos de captura e perda de elétron pelo projétil tornam-se importantes.

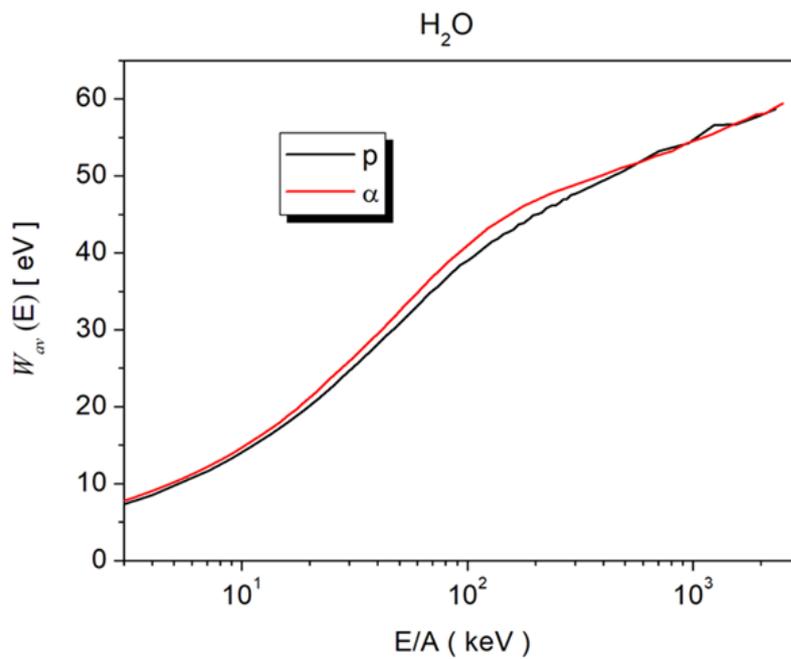
Figura 5 – Poder de freamento como função da energia da partícula incidente.



Fonte: a autora

Na Figura 6 apresentamos a energia média transferida aos elétrons $W_{med}(E)$ em função da energia E/A , calculada a partir do inverso do livre caminho médio, $\Lambda_p(E)$, e do poder de freamento, S , conforme a equação (3.4).

Figura 6 – Energia média transferida como função da energia da partícula incidente.



Fonte: a autora

Como pode ser observado, a energia média transferida para elétrons secundários é praticamente a mesma para as duas partículas (de fato, é um pouco superior para partículas α na maior parte do intervalo de E/A). Também, como esperado, W_{med} aumenta com o incremento de E/A , variando de pouco menos de 10 eV até aproximadamente 60 eV.

Elétrons de baixa energia na água participam de vários processos diferentes: espalhamento elástico, ionização, fixação de elétrons, bem como, excitações rotacional, vibracional e eletrônica. O espalhamento indireto, no qual o elétron é temporariamente capturado em um estado iônico transitório, (por exemplo, ligação de elétrons dissociativa) também é frequente nas interações de fase gasosa e condensada para elétrons de baixa energia.

Devido à natureza estocástica das colisões inelásticas de partículas carregadas se movendo através de meios condensados, sua distribuição de perda de energia eletrônica pode ser avaliada integrando os diferentes momentos da probabilidade de excitação eletrônica $P_q(E, \omega)$ sobre a transferência de energia, ω . Nas Figuras 7 e 8, apresentamos as probabilidades de excitação eletrônica calculadas através da equação (3.5) para alguns valores de E/A representativos, para prótons e partículas α , respectivamente. Esta magnitude permite definir o espectro de energia destes elétrons para o posterior cálculo das funções de distribuição de alcances dos elétrons secundários.

Figura 7 – Probabilidade de transferência de energia de próton para elétrons secundários em água.

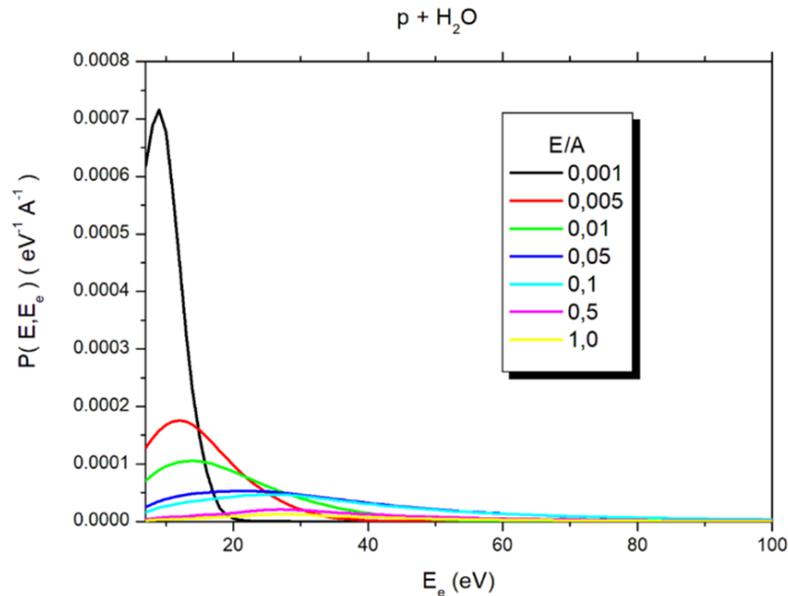
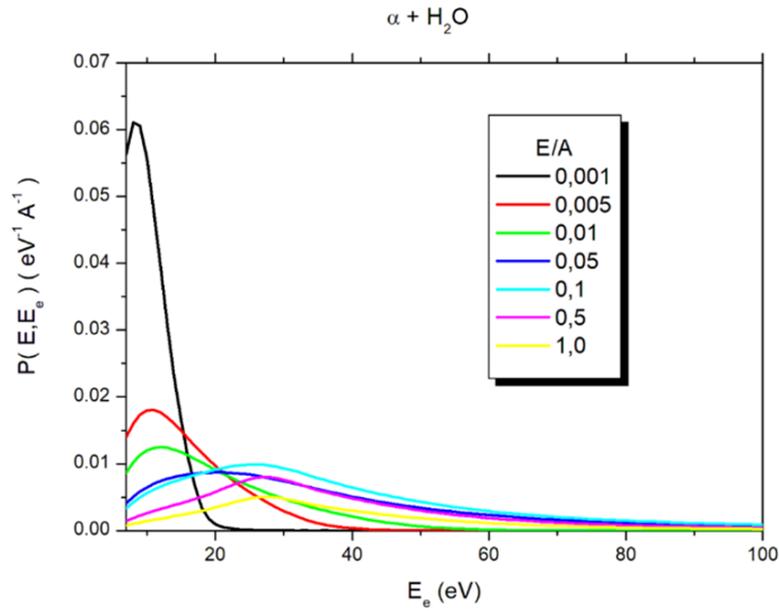


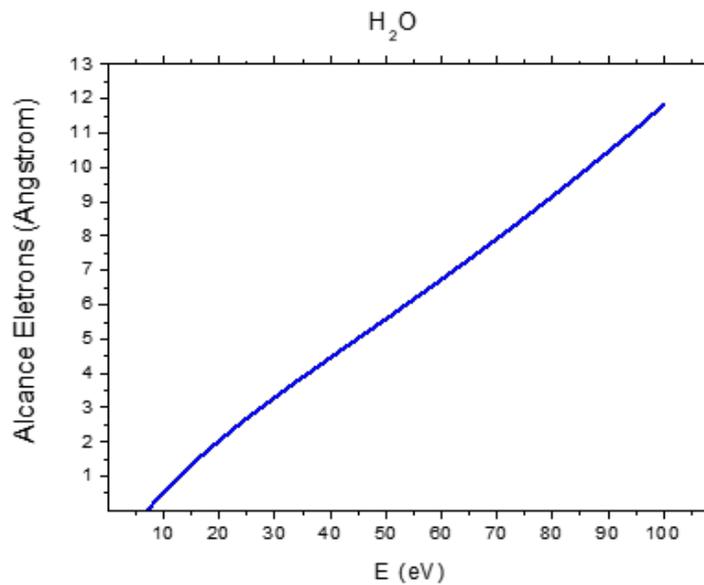
Figura 8 – Probabilidade de transferência de energia de partículas α para elétrons secundários em água.



Fonte: a autora

O alcance de elétrons calculado segundo as equações (3.6) e (3.7) é apresentado na Figura 9. O intervalo adotado foi de até 100 eV, visto que os espectros de elétrons secundários calculados não ultrapassam esse valor. Como pode ser observado, o alcance de elétrons calculado cresce de forma monotônica até o valor máximo de aproximadamente 12 Å.

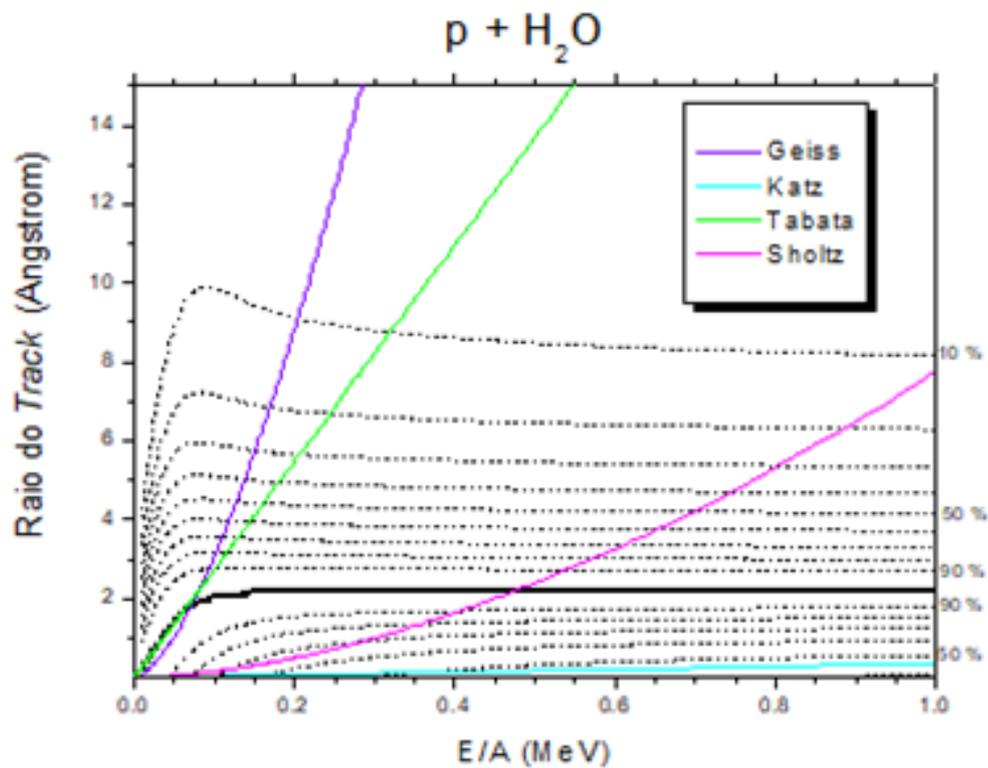
Figura 9 – Alcance de elétrons calculado na água.



Fonte: a autora

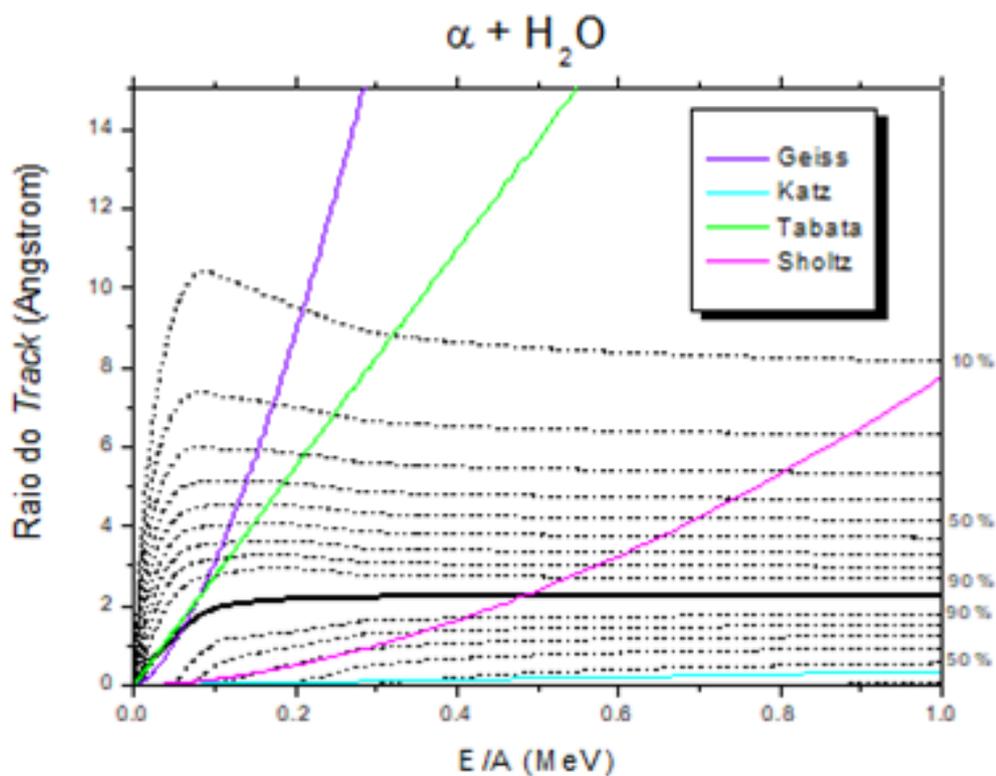
Nas Figuras 10 e 11 são apresentados os valores calculados para a faixa de penetração de elétrons secundários em água líquida em função da energia inicial de elétrons de 7 eV a 100 eV, produzidos por prótons e partículas α , respectivamente, com E/A até 1 MeV. Para cada energia dos íons, as funções de distribuição dos alcances calculados foram normalizadas no valor máximo. O valor de probabilidade máxima de alcance está indicado pela linha preta contínua e, pelas linhas tracejadas, os valores percentuais dos alcances, em relação ao valor máximo, divididos em intervalos de 10%.

Figura 10 – Faixa de penetração de elétrons secundários produzidos por prótons. Estão representados os resultados das parametrizações Katz, Geiss, Tabata e Scholz.



Fonte: a autora

Figura 11 – Faixa de penetração de elétrons secundários produzidos por partículas α . Estão representados os resultados das parametrizações Katz, Geiss, Tabata e Scholz.

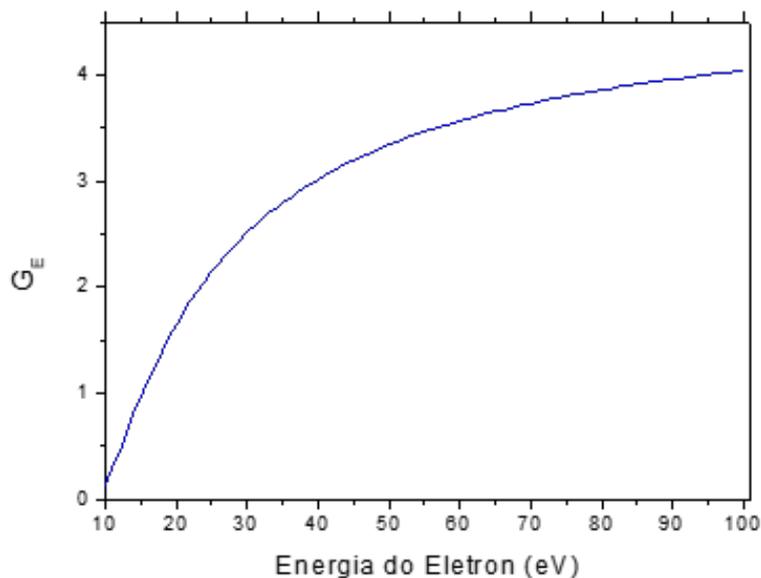


Fonte: a autora

Como pode ser observado, para as duas partículas em energias E/A menores que 200 eV, nosso resultado concorda bem com o modelo de raio de traço de Geiss (GEISS et al., 1997) e para E/A menor que ~ 300 eV, com o modelo de Tabata (TABATA et al., 1972). Os modelos de Katz (KATZ et al., 1996) e Scholz (SCHOLZ; KRAFT, 1994) estão inclusos nos nossos resultados, sendo que o primeiro está restrito na região abaixo do máximo de probabilidade de alcance e, o segundo, na região abaixo de 10% dessa probabilidade.

A partir da equação (3.9), uma estimativa baseada em experimentos da dependência energética da eficiência de ionização está apresentada na Figura 12.

Figura 12 – Eficiência de ionização em função da energia dos elétrons.

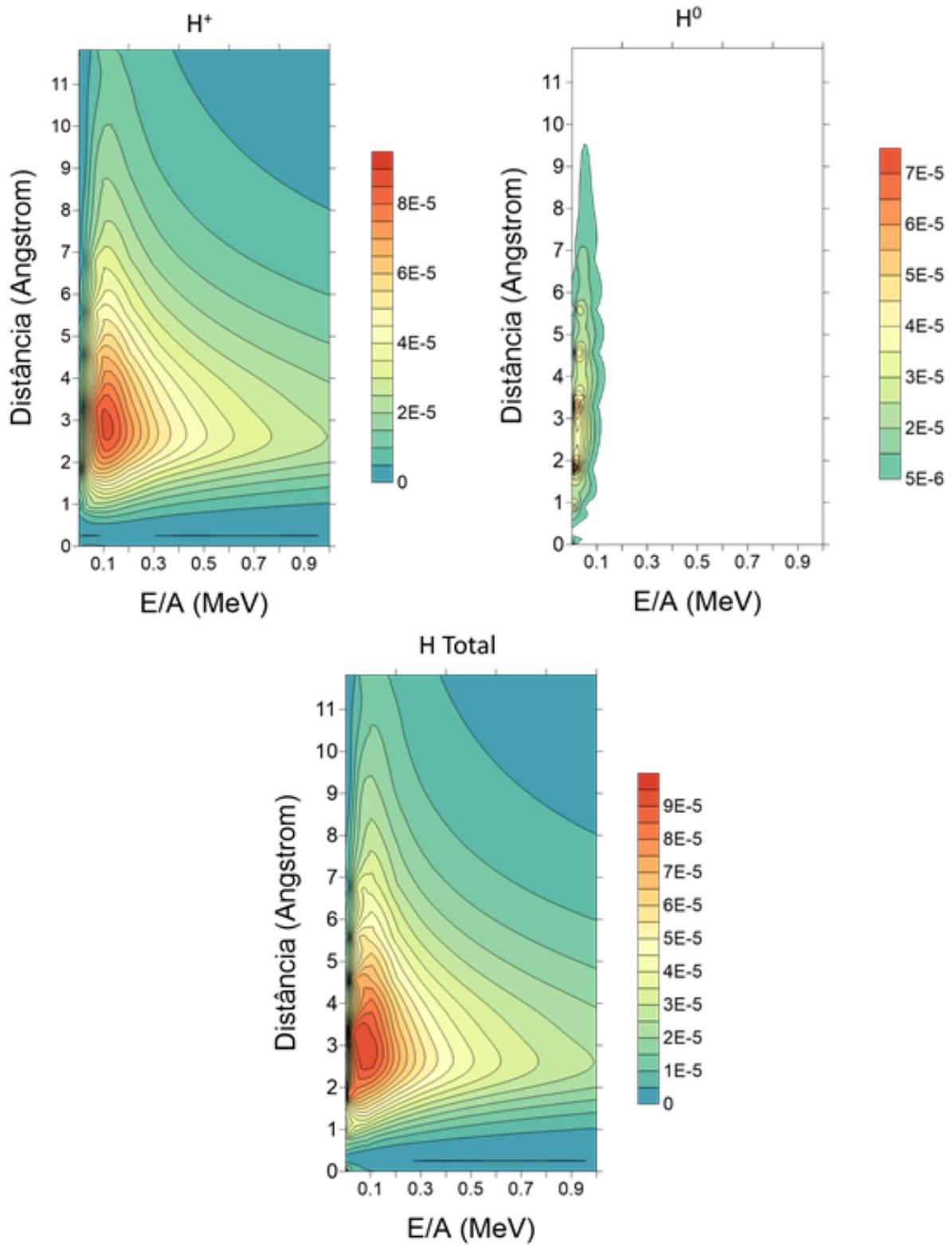


Fonte: a autora

Multiplicando a eficiência de ionização, dada pela equação (3.9), pela probabilidade de transferência de energia pelo próton e a partícula α para elétrons secundários, equação (3.5), é possível obter um mapa da probabilidade de formação de radicais livres com função da distância radial a partir do íon. Adicionalmente, podemos considerar a contribuição de cada estado de carga do íon para a formação de radicais livres.

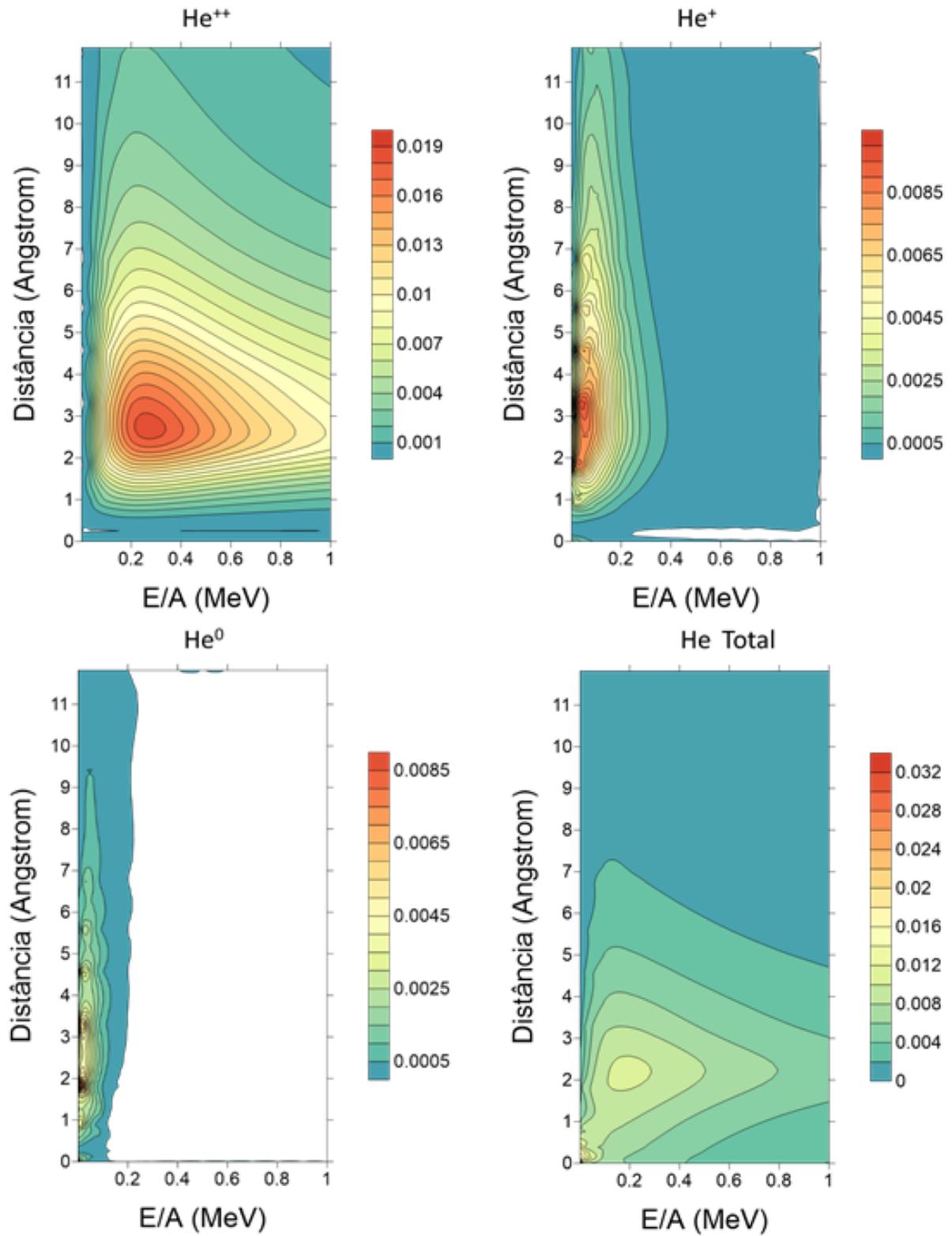
Nas Figuras 13 e 14 apresentamos os resultados obtidos para prótons e partículas α incidindo em água líquida. Os estados de carga de cada partícula, bem como o efeito total, estão identificados nas figuras. As distâncias radiais foram estimadas a partir dos alcances dos elétrons secundários calculadas com base nos seus espectros de energia com a equação (3.5).

Figura 13 – Eficiência de ionização em função da energia do próton e da distância radial.



Fonte: a autora

Figura 14 – Eficiência de ionização em função da energia da partícula α e da distância radial.



Fonte: a autora

O desenvolvimento de um traço após a deposição de energia, com a ionização e excitação, e a correspondente formação de radicais livres, acontece no trânsito do sistema para os equilíbrios químico e térmico convencionais, e é um processo numa escala de tempo de femtossegundos a picossegundos. Os resultados apresentados nas Figuras 13 e 14 representam um caso limite, que considera somente a emissão e de elétrons secundários na direção perpendicular ao feixe iônico, bem como a propagação instantânea deles. Nesse sentido, um cálculo pelo Método de Monte Carlo que considere as possíveis direções de emissão dos elétrons secundários, bem como a evolução temporal dos processos de difusão dos elétrons secundários, seria necessário para confirmar os resultados. De qualquer forma, é possível considerar que:

- No intervalo de energia estudado, e para as duas partículas, existe uma região a uma distância entre 2 e 3 Å do íon onde a probabilidade de produzir radicais livres é máxima.
- Presença de um pico na eficiência de produção de radicais livres para $E/A \sim 0,1$ MeV para prótons e $\sim 0,2$ MeV para partículas α .
- A contribuição dos estados de carga efetiva diferente de 0 é mais relevante para os dois íons. No caso do próton, a eficiência de produção de ionizações na posição do máximo ($E_p = 0,06$ MeV, $r_e = 3,18$ Å), tem uma contribuição de 78,5% do estado H^+ e de 21,5% do estado H^0 . Para a partícula α , as contribuições na posição do máximo ($E_p = 0,06$ MeV, $r_e = 3,18$ Å), dos estados He^{++} , He^+ e He^0 são, respectivamente, de 60%, 40% e 0.
- O impacto na produção de ionizações da carga efetiva 0 ficou restrito a energias muito baixas: $E/A < 0,1$ MeV para prótons e $E/A < 0,2$ MeV para partículas α .

6 Conclusão

Foi utilizada de forma bem-sucedida a formulação dielétrica na aproximação MELF-GOS para o cálculo de largura de traços produzidos por prótons e partículas α em alvos de água líquida, baseado nos alcances dos elétrons secundários obtidos a partir de seus espectros. Os resultados apresentaram boa compatibilidade com outros semelhantes já existentes para este fim.

Adicionalmente, foi calculada a eficiência de ionização, considerando os diferentes estados de carga dos dois tipos de feixes, para a situação limite de que os elétrons sejam todos emitidos na direção perpendicular ao feixe iônico e que eles se propagam instantaneamente. Para as duas partículas, foi identificada uma região de máxima produção de ionizações a uma distância de aproximadamente 3 \AA do feixe. Também foi obtido um pico para energias de $\sim 0,1 \text{ MeV}$ e $\sim 0,2 \text{ MeV}$ para prótons e partículas α , respectivamente.

Referências

- ABRIL, I. et al. *Dielectric description of wakes and stopping powers in solids*. Physical Review A, v. 58, Issue 1, p. 357–366, 1998. 14, 16
- BRANDT, W. *Effective charges of ions and the stopping power of dense media*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, v. 194, Issue 1–3, p. 13–19, 1982. 17
- CUCINOTTA, F. A. et al. *Calculation of heavy ion inactivation and mutation rates in radial dose model of track structure*. NASA Technical Paper, v. 3630, 1997. 19
- DA, B. et al. *Extended Mermin method for calculating the electron inelastic mean free path*. Physical Review Letters, v. 113, 063201, 2014. 16
- DE VERA, P. et al. *Semiempirical model for the ion impact ionization of complex biological media*. Physical Review Letters, v. 110, 148104, 2013. 14, 18
- DINGFELDER, M. et al. *Inelastic-collision cross sections of liquid water for interactions of energetic protons*. Radiation Physics and Chemistry, v. 59. p. 255–275, 2000. 14
- EMFIETZOGLOU, D. et al. *Inelastic cross-sections of energetic protons in liquid water calculated by model dielectric functions and optical data*. Nuclear Instruments and Methods B, v. 212, Issue 1, p. 101–109, 2003. 14
- EMFIETZOGLOU, D. et al. *A study on the electronic stopping of protons in soft biological matter*. Nuclear Instruments and Methods B, v. 242, Issue 1–2, p. 55–60, 2006.
- EMFIETZOGLOU, D. et al. *Electronic stopping power of liquid water for protons down to the Bragg peak*. Radiation Protection Dosimetry, v. 126, Issue 1–4, p. 97–100, 2007.
- FRIEDLAND, W. et al. *Simulation of DNA damage after proton irradiation*. Radiation Research, v. 159, Issue 3, p. 401–410, 2003. 17
- GARCIA-MOLINA, R. et al. *Calculated depth-dose distributions for H^+ and He^+ beams in liquid water*. Nuclear Instruments and Methods B, v. 267, p. 2647–2652, 2009. 14
- GEISS O. B. et al. *Efficiency of thermoluminescent detectors to heavy charged particles*. Nuclear Instruments and Methods B, v. 142, p. 592–598, 1997. 26
- GREILICH, S. et al. *Amorphous track models: A numerical comparison study*. Radiation Measurements, v. 45, Issue 10, p. 1406–1409, 2010. 20
- HALL, E. J.; *Radiobiology for the radiologist*. 7th. ed. Philadelphia: Lippincott Williams & Wilkins, 2012. 11, 12
- HEREDIA-AVALOS, S. et al. *Energy loss of H^+ and He^+ in the semiconductors GaAs, ZnSe, InP and SiC*. Nuclear Instruments B, v. 230, p. 118–124, 2005. 14
- HERRMANN, R. *Prediction of the response behavior of one-hit detectors in particle beams*. Dissertation (Doctor of Philosophy) – Faculty of Science and Technology, Aarhus University, Aarhus, 2012. 19

- INOKUTI, M. *Inelastic collisions of fast charged particles with atoms and molecules — The Bethe Theory Revisited*. *Reviews of Modern Physics*, v. 43, Issue 3, p. 297–347, 1971. 17
- INOKUTI, M. *Ionization yields in gases under electron irradiation*. *Radiation Research*, v. 64, n. 1, p. 6–22, 1975. 19
- KATZ, R. et al. *Inactivation of cells by heavy ion bombardment*. *Radiation Research*, Vol. 47, p. 402–425, 1971. 19
- KATZ, R. *Track structure theory in radiobiology and in radiation detection*. *Nuclear Track Detection*, v. 2, Issue 1, p. 1–28, 1978.
- KATZ, R. et al. *The calculation of radial dose from heavy ions: predictions of biological action cross sections*. *Nuclear Instruments and Methods B*, v. 107, Issue 1–4, p. 287–291, 1996. 26
- KORCYL, M. *Track structure modelling for ion radiotherapy*. Doctoral Dissertation – Faculty of Physics, Astronomy and Applied Computer Science, Department of Medical Physics, Jagiellonian University, Kraków, 2012. 19
- LINDHARD, J. *On the properties of a gas of charged particles*. *Matematisk-Fysiske Meddelelser*, v. 28, Issue 8, 1954. 16
- MERMIN, N. D. *Lindhard dielectric function in the relaxation-time approximation*. *Physical Review B*, v. 1, Issue 5, p. 2362–2363, 1970. 14, 17
- PAGANETTI, H. *Proton Therapy Physics (Series in Medical Physics and Biomedical Engineering)*. EUA: Taylor & Francis Group, 2017. 12, 13
- PIMBLOTTI, S. M.; MOZUMDER, A. *Structure of electron tracks in water. Distribution of primary ionizations and excitations in water radiolysis*. *Journal of Physical Chemistry*, v. 95, p. 7291–7300, 1991. 19
- SCHIWIETZ, G.; GRANDE, P. L. *Improved charge-state formulas*. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 175–177, p. 125–131, 2001. 17
- SCHIWIETZ, G.; GRANDE, P. L. *Stopping of protons – Improved accuracy of the UCA model*. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, v. 273, p. 1–5, 2012. 17
- SCHOLZ, M., KRAFT, G. *Calculation of heavy ion inactivation probabilities based on track structure, x-ray sensitivity and target size*. *Radiation Protection Dosimetry*, v. 52, Issue 1–4, p. 29–33, 1994. 26
- SUIT, H. et al. *Proton vs carbon ion beams in the definitive radiation treatment of cancer patients*. *Radiotherapy and Oncology*, v. 95, Issue 1, p. 3–22, 2010. 14
- SUN, S. Q. et al. *Quantitative water mapping of cryosectioned cells by electron energy-loss spectroscopy*. *Journal of Microscopy*, v. 177, Issue 1, p. 18–30, 1995. 14
- TABATA T. et al. *Generalized semiempirical equations for the extrapolated range of electrons*. *Nuclear Instruments and Methods*, v. 103, Issue 1, p. 85–91, 1972. 19, 26
- WALIGÓRSKI, M. P. R. et al. *The radial distribution of dose around the path of a heavy ion in liquid water*. *Nuclear Tracks and Radiation Measurements*, v. 11, p. 309–319, 1986. 19
- ZHANG, C. X. et al. *Radial distribution of dose and cross-section for inactivation of dry enzymes and viruses*. *Radiation Protection Dosimetry*, v. 13, p. 215–218, 1975. 19