

Estudo da contribuição do espalhamento nuclear não elástico na trajetória mais provável de prótons em alvo homogêneo composto de água.

Maurício Tizziani Pazianotto

Orientador: Prof. Dr. Joel Mesa Hormaza

Supervisor: Prof. Dr. Paulo Fernando de Arruda Mancera

Botucatu

2009

Estudo da contribuição do espalhamento nuclear não elástico na trajetória mais provável de prótons em alvo homogêneo composto de água.

Maurício Tizziani Pazianotto

Monografia apresentada ao Instituto de Biociências da Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", Campus de Botucatu, para obtenção do título de Bacharel em Física Médica.

Orientador: Prof. Dr. Joel Mesa Hormaza
Supervisor: Prof. Dr. Paulo Fernando de Arruda Mancera

Botucatu
2009

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA SEÇÃO TÉCNICA DE AQUISIÇÃO E TRATAMENTO
DA INFORMAÇÃO
DIVISÃO DE BIBLIOTECA E DOCUMENTAÇÃO - CAMPUS DE BOTUCATU - UNESP
BIBLIOTECÁRIA RESPONSÁVEL: SELMA MARIA DE JESUS

Pazianotto, Maurício Tizziani.

Estudo da contribuição do espalhamento nuclear não elástico na trajetória mais provável de prótons em alvo homogêneo composto de água / Maurício Tizziani Pazianotto. - Botucatu [s.n], 2009.

Trabalho de conclusão (bacharelado – Física médica) – Universidade Estadual Paulista, Instituto de Biociências de Botucatu, 2009

Orientador: Joel Mesa Hormaza

1. Diagnóstico por imagem 2. Câncer - Tratamento 3. Prótons - Efeitos fisiológicos

Palavras-chave: Método de Monte Carlo; Protonterapia; Teoria de Moliere; Tomógrafo com feixe de prótons

Agradecimentos

Primeiramente quero agradecer a Deus por ter me dado saúde e sabedoria na realização deste trabalho em mais uma etapa concluída. E por ter colocado pessoas realmentes muito importantes em minha vida, pessoas essas que levarei para sempre, independente do que aconteça. E que Ele continue sempre nos abençoando.

Manifesto aqui um carinho e consideração por todos da Turma III de Física Médica que compartilharam comigo essa experiência fascinante que foi passar pela universidade, mesmo aqueles que não tive tanta vivência. A cada um tenho boas lembranças, principalmente aos meus amigos e companheiros com quem morei esses anos: Antonio, David, Glauco, Vander, Guilherme e Ivan.

À uma pessoa maravilhosa, namorada e amiga, Bethania, gostaria de dedicar grande parte deste trabalho. Ela foi quem me muito me ensinou como pessoa, e sempre esteve ao meu lado. Gostaria de simplesmente dizer que muito não seria possível sem ela. Agradeço por ela existir em minha vida. Te amo.

Agradeço meus amigos e companheiros Danilo e Guilherme que muito me ajudaram na realização deste e também ao grupo que compõe o Laboratório de Bioinformática e Biofísica Computacional (LBBC) em especial ao Chokito.

Agradeço meu Orientador e amigo, Prof. Dr. Joel Mesa Hormaza. Pessoa que muito admiro e sempre me ajudou e motivou em minha vivência acadêmica. Obrigado Joel, pela confiança e dedicação junto a mim neste trabalho.

Gostaria de agradecer aos professores Drs Roberto Morato Fernandez, Ney Lemke, Paulo Fernando de Arruda Mancera pela disposição em ensinar e motivação durante minha graduação.

Por fim, agradeço a minha família, meu pai (Benedito), minha mãe (Sandra) e minha irmã (Sabrina). Pessoas estas me acompanharam deste meus primeiros passos, e hoje me veem como um formando. Sempre depositaram confiança em mim e com certeza farei de tudo para ser digno disto. Sem vocês não conseguiria, vocês são tudo pra mim.

Resumo

A Terapia com feixe de Prótons tem se mostrado mais efetiva para o tratamento de câncer à Radioterapia. No entanto, em seu planejamento se usa a Tomografia Computadorizada de Raios-X que não se leva em consideração as diferenças fundamentais entre a interação dos Raios-X e dos prótons com a matéria. Atualmente, há um grande esforço para se desenvolver Tomógrafos com Feixe de Prótons. Para tanto, é de grande importância saber a trajetória mais importante do feixe de prótons a fim de haver de modo exato a reconstrução da imagem. Neste trabalho foram realizados os cálculos da trajetória de um feixe de prótons em um meio homogêneo composto de água levando em consideração as interações inelásticas nucleares, e também os cálculos analíticos para a deflexão lateral do feixe de prótons. No estudo foram empregados códigos fundamentados no método Monte Carlo: SRIM 2006 (*Stopping and Range of Ions in Matter*), MCNPX (*Monte Carlo N-Particle eXtended*) v2.50. Para os cálculos analíticos utilizou-se o *Wolfram Mathematica* v7.0. Com isso se obteve como os diferentes modelos de tratamento de reações nucleares implementados nos código alteram as trajetórias obtidas e as respectivas comparações entre o método Monte Carlo e Analítico.

Palavras-chave: Protonterapia, Tomógrafo com feixe de Prótons, Método de Monte Carlo, Teoria de Moliere.

Abstract

The Therapy with proton beam has shown more effective than Radiotherapy for oncology treatment. However, to its planning use photon beam Computing Tomography that not considers the fundamentals differences the interaction with the matter between X-rays and Protons. Nowadays, there is a great effort to develop Tomography with proton beam. In this way it is necessary to know the most likely trajectory of proton beam to image reconstruction. In this work was realized calculus of the most likely trajectory of proton beam in homogeneous target compound with water that was considered the inelastic nuclear interaction. Other calculus was the analytical calculation of lateral deflection of proton beam. In the calculation were utilized programs that use Monte Carlo Method: SRIM 2006 (*Stopping and Range of Ions in Matter*), MCNPX (*Monte Carlo N-Particle eXtended*) v2.50. And to analytical calculation was employed the software *Wolfram Mathematica* v7.0. We obtained how different nuclear reaction models modify the trajectory of proton beam and the comparative between analytical and Monte Carlo method.

Key-words: Proton Therapy, Tomography with proton beam, Monte Carlo Method, Moliere Theory.

Índice

	Página
Resumo	3
Abstract	4
1 Introdução	7
1.1 Histórico	7
1.2 Motivação	9
2 Objetivo	11
2.1 Objetivos Gerais	11
2.2 Objetivos Específicos	11
3 Metodologia	12
3.1 Características do alvo e do feixe	12
3.2 Simulação Computacional	12
3.2.1 Método de Monte Carlo	12
3.2.2 O Programa SRIM 2006	13
3.2.3 O Código MCNPX	14
3.3 Cálculo Analítico	16
4 Resultados e Discussão	18
4.1 Cálculo da Trajetória mais provável	18
4.1.1 SRIM	18
4.1.2 MCNPX	21
4.2 Cálculo do Ângulo de deflexão lateral do feixe	24
4.2.1 SRIM	24
4.2.2 MCNPX	25
4.2.3 Cálculo Analítico	26
5 Conclusão	29
6 Trabalhos apresentados	30
Referências	33
Apêndice	35

A	Arquivo MCNPX	35
B	Código implementado no <i>Mathematica v7.0</i>	36

1 Introdução

1.1 Histórico

Em 1946 Robert Wilson sugeriu a utilização de prótons no tratamento de tumor devido as suas vantagens na distribuição de dose. Quando o feixe de próton interage com a matéria produz uma deposição de energia caracterizada pela baixa dose na região mais superficial e, próximo ao final do percurso, a dose cresce até atingir um pico máximo, denominado pico de Bragg, e depois cai abruptamente a zero. Portanto, a alta dose da radiação ionizante pode ser depositada no tumor, não excedendo a dose tolerante nos tecidos sadios. Wilson propôs muitos conceitos inovadores que posteriormente foram usados em Protonterapia e na modulação da dose utilizando o pico de Bragg para uma região a ser tratada como mostra a Figura 1. [1]

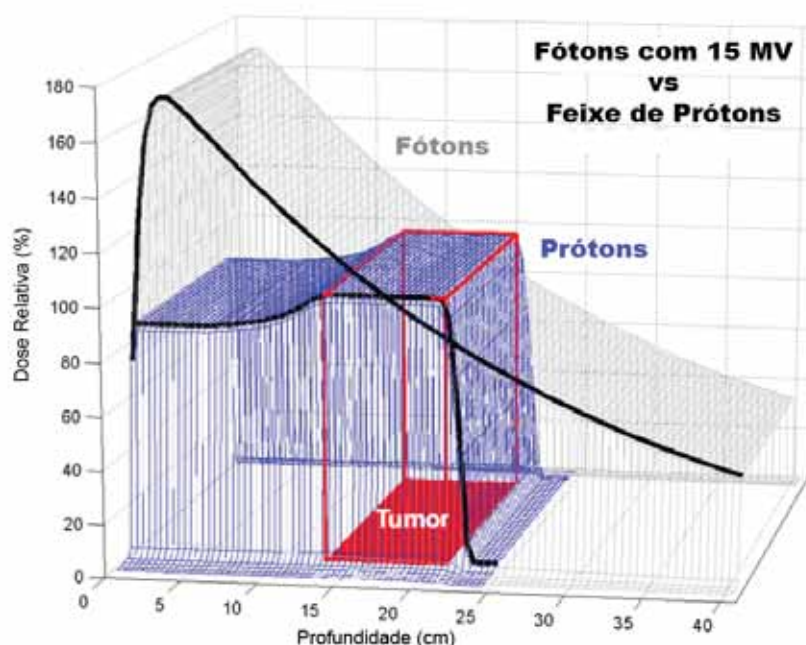


Figura 1: Comparação da deposição de dose para um tratamento por feixe de fóton e de prótons.[1]

Ernest Lawrence desenvolveu o ciclotron no Laboratório Lawrence Berkeley (LLB) na Universidade de Califórnia em 1930 e em 1939 ganhou o Prêmio Nobel por isso. Assim como na terapia com fótons, os avanços na próton terapia são dependentes do desenvolvimento de novos aceleradores. Os primeiros a usar prótons para o tratamento em pacientes humanos foram o C. A. Tobias, o J. H. Lawrence entre outros, em meados 1950 no LLB. Eles trataram a glândula pituitária usando o pico de Bragg de modo com que este aconteça na profundidade do alvo.[1]

No final de 1950, B. Larsson e L. Leksell, trabalhando no Instituto Gustaf Werner em Uppsala, Sweden, desenvolveram técnicas de radiocirurgia com feixe de prótons para o tratamento de tumores cerebrais. Eles foram os primeiros a usar esta técnica a fim de modular a dose em uma região uniforme ao longo do caminho do feixe de prótons.[1]

Em 1961, o neurocirurgião Ray Kjellberg do Hospital de Massachusetts, começou tratar pequenos alvos intracranias com técnicas de radiocirurgia no Laboratório do Cíclotron de Harvard (LCH) em Cambridge. Esses tratamentos evoluíram em um programa que continua, atualmente, a terapia com prótons no novo Hospital de Massachusetts que é o Centro de Terapia com Prótons do Nordeste. Andy Koehler, diretor do LCH, e um grupo de físicos trabalhavam com Kjellberg no desenvolvendo instrumentação, novos métodos e técnicas de radiocirurgia com feixe de prótons. É interessante notar que esses tratamentos eram realizados sem ajuda de técnicas modernas de imagem, porém recentemente uma análise das técnicas originais indicou que elas funcionavam bem.[1]

Durante o final de 1960 e a década de 1970, havia atividades em Protonterapia e muita pesquisa em física voltada nesta área no mundo todo. A Rússia em particular tinha programas dedicados a Protonterapia se iniciando em 1968 no Instituto de Pesquisas Nucleares, em 1969 no Instituto de Física Teórica e Experimental de Moscow e em 1975 em St Petersburg. O Instituto National de Ciências Radiológicas em Chiba, Japão, começou tratamentos em 1979, e em 1980 foi desenvolvido um sistema de escaneamento para a terapia com feixe de prótons.[1]

Do final de 1980 até 2000, houve uma grande ascensão das atividades de Protonterapia ao redor do mundo, como programas começando em Clatterbridge, Inglaterra em 1989; na Fraça em Nice e Orsay em (1991); iThemba Labs em Cape Town, África (1993); Villigen, Suíça (1996); em Berlim, Alemanha (1998); Kashiwa, Japão (1998) e Dubna, Rússia (1999).[1]

O primeiro hospital de Protonterapia foi criado nos finais da década de 1980, nos Estados Unidos na Universidade de Loma Linda, Califórnia. Os primeiros pacientes começaram a ser tratamentos em 1990. Esta instalação foi o resultado do trabalho do Dr James Slater, o qual foi o Presidente do Departamento de Medicina. Na instalação havia um Síncrotron de 250 MeV, o qual foi projetado e construído pelo Fermilab.[1]

Atualmente, em torno de um terço dos 15000 aceleradores de partículas usados no mundo está voltado a biomedicina: 3% é empregado na medicina nuclear e 30% é voltado à radioterapia. A maioria destes produz raios-X, enquanto apenas 25% são usados como fonte de feixe de prótons. Porém, hoje no mundo aproximadamente 40000 pacientes foram tratados utilizando a técnica de Protonterapia e 30 instituições como instalações de para este tratamento. Pesquisa de mercado indica um potencial para 140 instalações, somente nos EUA, para as próximas duas décadas [2]. Aceleradores de prótons modernos, que têm mostrado funcionarem com segurança no ambiente hospitalar, estão agora disponíveis no

mercado.[3]

1.2 Motivação

Como bem conhecido, a deposição de energia de feixes de fótons é caracterizado por haver uma absorção exponencial após atingir a absorção máxima do feixe (aproximadamente de 2 a 3 cm para uma feixe de 8 MeV, esta região é denominada região de *build-up*) [4]. Após a região de *build-up*, há um decréscimo exponencial na deposição de energia com o aumento da profundidade. Em contrapartida, prótons mostram um aumento na deposição de energia com o aumento da profundidade, até atingir uma máxima deposição de energia próximo ao alcance do feixe de prótons como mostra a figura 2.[5]

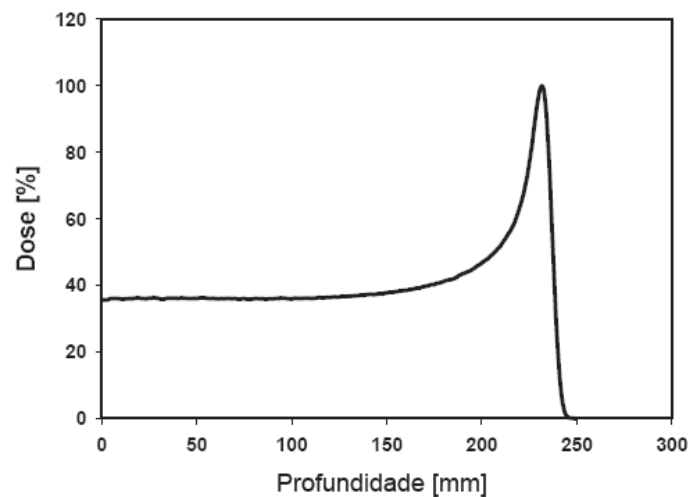


Figura 2: Figura representativa da dose normalizada em relação a profundidade.

Prótons movendo ao longo de tecidos perdem sua energia através de interações atômicas e nucleares. Essa diminuição de energia dos prótons faz com que aumente sua interação com elétrons dos átomos. A máxima interação com os elétrons ocorre no fim do alcance do feixe incidente, causando a máxima deposição de energia no alvo. Essa característica física dos prótons faz com que haja uma grande vantagem do tratamento com feixe de prótons em relação à radioterapia convencional, pois a região de máxima deposição de energia pode ser estabelecida dentro do alvo para cada direção do feixe. Isso cria um alto ajuste conformacional da região de dose, possibilitando cobrir o volume tumoral com alta exatidão. Além disso, esta técnica possibilita que haja uma baixa dose acumulada em tecidos saudáveis em relação à terapia com fótons ou elétrons.[5]

Com a existência de uma alta taxa de dose em uma região específica é de grande importância haver um planejamento exato de forma a concentrar a dose apenas no volume

tumoral. Para tanto se utiliza técnicas de imagem que se baseiam na tomografia com feixe de fótons (xCT).

Utilizar a tomografia com feixe de fótons para o planejamento em Protonterapia não é a forma mais apropriada e precisa, pois a utilizando é ignorado a diferenças fundamentais que existe entre os processos de interações dos fótons e prótons. Além disso, as imagens em xCT são melhores em se tratando de estruturas esqueléticas, frequentemente para tumores elas não apresentam um bom contraste.[6]

O conceito moderno do método pCT foi publicado recentemente [7]. Ele propõe o uso de um método baseado na medida de perda da energia por prótons acoplado com uma técnica moderna de *tracking*, desenvolvida na área de física de altas energias. Tal sofisticação do método exige um estudo mais profundo de alguns aspectos físicos e técnicos envolvidos em reconstrução de imagens pCT [8].

Uns dos fatores que definem a reconstrução da imagem, ou seja, a resolução de borda da imagem para a tomografia por feixe de prótons (pCT) é a determinação exata da trajetória mais provável de prótons em um determinado meio assim como o modo com que os prótons espalham. Neste é determinado o ângulo de espalhamento dos prótons (ângulo de deflexão) em relação ao eixo onde incidem os prótons.

Quando os prótons incidem em um alvo há numerosas colisões e interações a baixo ângulo pelo campo Coulombiano dos elétrons e do núcleo do átomo [8]. Como energia utilizada em Protonterapia é em torno de 200 MeV , deve-se levar em consideração também as interações nucleares.

Se um feixe de próton incidente com uma energia superior a energia de ligação dos nucleons, pode provocar reações resultando em um núcleo residual e emissão de radiação ou de prótons denominados secundários.

Quando um feixe de partículas atravessa um material, vários processos distintos podem acontecer. Algumas partículas atravessam o material sem que ocorra nenhum tipo de interação, enquanto outras são defletidas devido a suas interações ou colisões com os átomos do material. [9]

A interação ou colisão entre duas partículas é usualmente descrita em termos da seção de choque de colisão, que é por definição uma medida da probabilidade que um encontro entre partículas resulte na ocorrência de uma determinada reação atômica ou nuclear. Esta grandeza, basicamente, é a medida da interação efetiva entre o projétil e o alvo. Quanto maior a seção de choque, mais provável será a deflexão do projétil. A seção de choque depende dos tipos de partículas envolvidas e usualmente depende da velocidade ou energia da partícula no feixe incidente, sendo inversamente proporcional a esta. [9]

2 Objetivo

2.1 Objetivos Gerais

Este trabalho tem-se por objetivo servir como suporte ao desenvolvimento de um sistema tomográfico com feixe de prótons [10].

Tem-se por objetivo também estabelecer um conjunto padrão de procedimentos para simulações computacionais da pCT, assim como desenvolver seus fantasmas. Pretende-se avaliar a sensibilidade do método pCT para as pequenas variações de densidade dentro de um objeto. Além disso, pretende-se analisar plásticos padrões para simular os materiais biológicos em radiologia. O mecanismo de interação de prótons com a matéria envolve o potencial médio de ionização, o que pode prejudicar a alta verossimilhança de representação de tecidos humanos, por exemplo, questionada em caso da terapia com feixe de prótons.

Outro estudo que o sistema propõe é a capacidade de fazer a avaliação de plásticos, atualmente usados na produção de *fantomas* para uso em radiologia médica. A passagem de prótons através de um meio é sensível ao potencial médio de ionização. Como resultado, as variações de densidade volumétrica de elétrons, reconstruídas pelo método pCT, serão afetadas em uma maneira diferente ao que acontece no caso da tomografia convencional com raios-X. [10]

2.2 Objetivos Específicos

Este projeto tem por objetivo calcular a trajetória mais provável do próton em meio de interesse biológico e homogêneo através do emprego dos códigos baseados no método de Monte Carlo: SRIM 2006 (*Stopping and Range of Ions in Matter*)[11] e MCNPX (*Monte Carlo N-Particle eXtended*) v2.50 [12].

Também se tem por objetivo comparar o ângulo de deflexão dos prótons em meio homogêneo através do cálculo pelo método Monte Carlo e do método analítico. Sendo assim, haverá comparações entre diferentes procedimentos e, a cada um, levará em consideração interações elásticas, inelásticas com elétrons do átomo e interações nucleares.

3 Metodologia

3.1 Características do alvo e do feixe

Os cálculos serão realizados num alvo na forma de paralelepípedo composto por água (densidade de 1 g/cm^3). O cubo possui 20 cm de profundidade no sentido do eixo x e 10 cm de lado (referente ao plano yz) como mostra a Figura 3.

A incidência dos feixes de prótons no intervalo de energias de interesse em protonterapia ($100 \text{ MeV} - 250 \text{ MeV}$), será pelo centro da base do paralelepípedo. Foram estudados feixes no formato *Pencil Beam* e estritamente monoenergéticos.

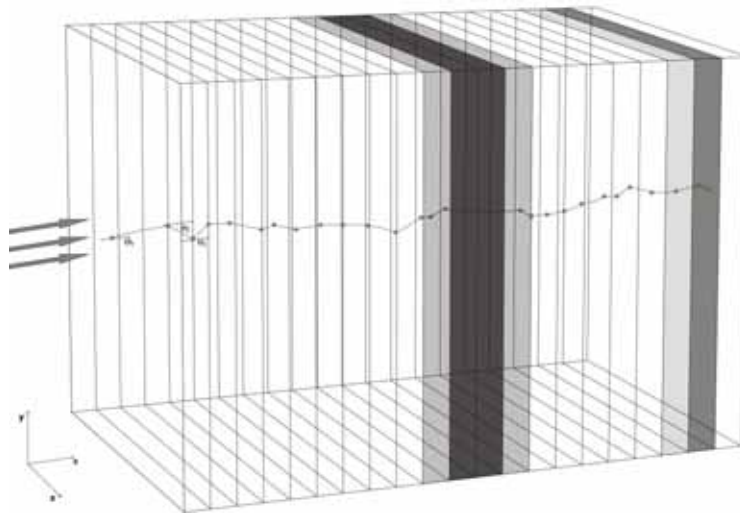


Figura 3: Esquema representativo do alvo e o feixe incidente com os respectivos ângulos de deflexão.

3.2 Simulação Computacional

3.2.1 Método de Monte Carlo

É aceito 1949 como o ano em que foi criado o método de Monte Carlo, quando foi publicado um artigo com o nome de "O Método de Monte Carlo" de Metropolis e Ulam. Os matemáticos John von Neumann e Stanislaw Ulam são considerados seus principais criadores. Na União Soviética, os primeiros artigos sobre o Método de Monte Carlo foram publicados em 1955 e 1956 por V. V. Chavchanidze, Yu. A. Shreider e V. S. Vladimirov. [13]

Curiosamente, a formulação teórica do método foi realizada antes do artigo de Neumann-Ulam. Além disso, alguns problemas estatísticos foram resolvidos antes de 1949 por amostragem randômica, de fato sendo pelo método de Monte Carlo. Porém, a simulação

de variáveis randômicas feita manualmente é um processo difícil, e a utilização do método de Monte Carlo tornou-se uma técnica numérica universal com o emprego de computadores. [13]

O nome Monte Carlo se origina de uma cidade de Monaco conhecida pela tradição de seus cassinos, nos quais há dispositivos mecânicos que geram números randômicos. [13]

Este método é uma solução numérica para problemas que modela objetos interagindo com outros objetos ou com o meio onde ele está inserido. Isso representa uma tentativa para modelar através de uma simulação direta da dinâmica essencial do sistema em questão. Neste sentido, o método de Monte Carlo é essencialmente simples para sua aproximação — uma solução para um sistema macroscópico através de uma simulação das interações microscópicas. [14]

A solução é determinada por uma amostragem randômica das interações microscópicas até o resultado convergir. Para tanto, o mecanismo de execução de uma solução desse método envolve repetitivas ações, ou cálculos. Para generalizar muitas interações microscópicas são utilizados modelos matemáticos. Portanto, métodos de Monte Carlo são técnicas estocásticas, ou seja, que baseiam nos números randômicos e nas estatísticas probabilística para investigar problemas. Atualmente esse método é empregado, por exemplo, em ciências sociais, genética, química quântica, radioterapia, dosimetria, etc. [14]

Os programas que serão apresentados a seguir têm o método de Monte Carlo por base.

3.2.2 O Programa SRIM 2006

O programa SRIM agrupa um conjunto de rotinas que calculam o poder de parada (*stopping power*) e o alcance de íons na matéria, mediante uma formulação mecânico quântica das interações íon (feixe)—átomo (alvo). Este cálculo tem sido aprimorado através do emprego de algoritmos estatísticos de otimização.

Em seu algoritmo se leva em consideração as interações elásticas devido ao campo Coulombiano do núcleo. [11]

O SRIM foi utilizado para um feixe de prótons de energia entre 150 *MeV* e 250 *MeV*, realizando 50000 interações. Para cada interação, foram obtidas as posições dos prótons e os ângulos com que estes se espalhavam (ângulo de deflexão) a cada profundidade. Assim foi feito a média e o respectivo desvio para as posições e os ângulos de deflexão.

Na Figura 4 é mostrado como é apresentado a interface do SRIM, na qual consiste, basicamente, nos seguintes dados: energia inicial do feixe (em *Energy*), o número de interações (em *Total Number of Ions*), o tipo de material do alvo (em *Target data*) e composição do feixe incidente (em *Ion Data*).

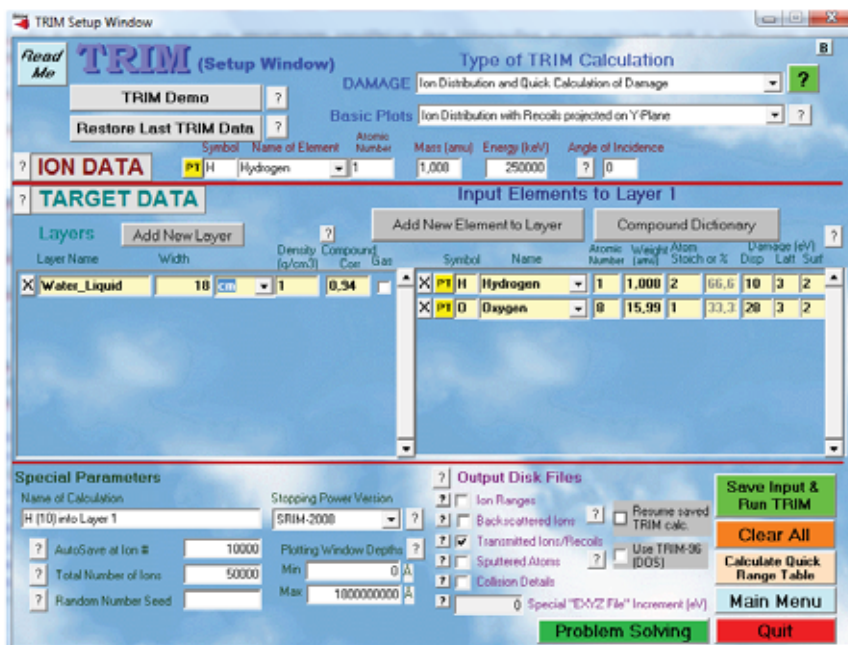


Figura 4: Esquema representativo do *file* de entrada so SRIM.

3.2.3 O Código MCNPX

O MCNPX, desenvolvido em *Los Alamos National Laboratory* (LANL), é um código de simulação de Monte Carlo em 3-D para o transporte de radiação na matéria, com uma grande variedade de opções de dados de entrada, capaz de processar a trajetória de 34 tipos diferentes de partículas e/ou íons num extenso intervalo de energias. Ele emprega as bases de dados das bibliotecas avaliados disponíveis até o momento atual assim como diferentes modelos físicos para suprir a falta destes dados. O código foi desenvolvido em FORTRAN90 e pode ser compilado tanto em todas as plataformas LINUX ou UNIX, como em WINDOWS, sendo possível a implementação do processamento paralelo. [12]

Todas estas características fazem deste código uma ferramenta muito conveniente e poderosa no campo da proteção radiológica, modelagem de instalações nucleares, detectores, medicina nuclear e blindagem de radiação. [12]

Para a implementação dos cálculos no MCNPX, há um formato bastante peculiar, no qual é composto pela estrutura geral que segue [15]:

Título do problema:

Bloco de células - "Cell Cards"

-
-
-

Linha em branco

Bloco de superficies - "Surface Cards"

•
•
•

Linha em Branco

Bloco de Dados - "Data Cards"

•
•
•

Linha em Branco

Esta estrutura deve ser escrita exatamente deste modo para serem realizados os cálculos, caso não assim não esteja o cálculo não prossegue. Abaixo será apresentado a explicação de cada linha da estrutura acima [15]:

- **Título do problema:** Esta é a primeira linha que aparece nos dados de entrada do código MCNPX. Esta linha pode conter diversas informações; entretanto e recomendável que se deva escrever sucintamente o problema que esta sendo simulado, porque este título aparecera em várias partes dos arquivos de saída do MCNPX.
- **Bloco de células – "Cell Cards":** Nesta parte dos dados de entrada, é feita a construção da geometria do problema e para esta representação geométrica, utilizam-se combinações de formas geométricas pré-definidas, como: planos, esferas, cilindros, dentre outras. As regiões são combinadas utilizando-se operadores tais como intersecções e uniões.
- **Bloco de superficies – "Surface Cards":** São selecionadas as formas geométricas a serem utilizadas na representação geométrica do problema; para isto, são usados caracteres indicando o tipo de superfície e em seguida os coeficientes da equação da superfície selecionada.
 - Descrição do Material: Aqui também é realizado a descrição do material correlacionando com sua estrutura. Os materiais são representados pela composição isotópica, através da estrutura Z (Número de Massa) e A (Número Atômico).
- **Bloco de Dados – "Data Cards":** Parte dos dados de entrada onde é descrita a parte da física do problema; de uma forma geral, esta parte é composta da seguinte forma:

- Tipos de Radiação – MODE Card: Onde é feita seleção do tipo de radiação (ou radiações) que será simulada no problema, no caso foi utilizado Próton representado pela letra h.
- A Função do comando – IMP Card: Esta função representa a importância da partícula, que é utilizada no MCNPX para:
 - * Finalizar a história de uma partícula coloca-se $IMP = 0$, e o transporte da partícula não será simulado.
 - * Realizar a separação das regiões geométricas de maior importância para as de menor importância.
- Delimitações do problema: Nesta opção são apresentados os limites impostos pelo usuário para a finalização do problema, tais como, energia, número de interação (NPS), etc. O MCNPX utiliza este parâmetro como um limitador para cada uma das opções selecionadas. Como por exemplo, pode-se citar o número de interação que quando for atingido, interromperá a execução do programa. Outro parâmetro importante a ser discutido é em relação ao LCA, que demonstra qual o modelo de interação que será utilizado pelo programa, são eles: Bertini, Isabel, CEM2K ou INCL4.
 - * Especificações da fonte: Existem várias opções para descrever a fonte no MCNPX, porém algumas características são comuns, tais como: posição da fonte, energia, tipo de partícula, dentre outros dados que caracterizam a fonte.

Os cálculos realizados utilizando o MCNPX foram feitos para energias entre 150 e 250MeV com 10^7 interações. Para cada energia foi obtido como saída de dados, informações com respeito ao posicionamento, ângulo de deflexão das partículas, entre outras que não foram utilizadas. Para selecioná-las, frente a um grande número de informações, foi utilizado os comandos *bash* do Terminal do *Linux*.

3.3 Cálculo Analítico

Foi calculado o ângulo de deflexão para cada profundidade a fim de estabelecer como o o feixe de prótons incidente se comporta ao logo de sua trajetória. O cálculo foi baseado na Teoria de Moliere da deflexão lateral [16] a qual não leva em consideração as interações nucleares e considera interações com o campo Coulombiano do núcleo e colisões inelásticas com elétrons dos átomos. A frequência de distribuição de Moliere do ângulo de deflexão é obtida de uma interpretação estatística das múltiplas interações Coulombianas.

No problema será considerado um feixe constituído de partículas monoenergéticas e uniformemente distribuída em uma área seccional infinitesimal $dydz$ e viajando ao longo do eixo x , como demonstra a Figura 3.

Na Teoria de Moliere do espalhamento de partículas carregadas a quantidade central é o ângulo característico χ_c que é dado por:

$$\chi_c^2 = \int_0^x dx' \rho(x') \sum_j w_j(x') h_j(x') \left(1 - \frac{x'}{x}\right)^2 \quad (1)$$

onde $w_j(x')$ é a fração dos constituintes atômicos do material e $h_j(x')$ que é dado por:

$$h_j(x') = 4\pi N_a \left\{ r_e \frac{m}{M} \frac{\tau(x') + 1}{\tau(x') [\tau(x') + 2]} \right\}^2 \frac{Z_j^2(x')}{A_j^2(x')} \quad (2)$$

Acima $\rho(x')$ é densidade do material que é constante em função da profundidade, pois se trata de um meio homogêneo (água), N_A é o número de Avogadro, r_e é o raio clássico do elétron, $\tau(x')$ é energia cinética da partícula, m/M é a razão entre as massas do elétron (m) e próton (M), Z_j é o número atômico do material e A_j é o peso atômico do material.

Introduz-se agora, o ângulo característico de Moliere:

$$\theta_M = \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_c \sqrt{B} \quad (3)$$

onde o parâmetro B é o número de colisões do feixe com o alvo até uma profundidade Z (20 cm). Segue o cálculo de B :

$$B = 1.153 + 2.583 \log_{10} \left(\frac{\chi_c^2}{\chi_a^2} \right) \quad (4)$$

O ângulo χ_a^2 considera o efeito de blindagem do núcleo atômico pelos elétrons atômicos e é dado por:

$$\ln[\chi_a^2(x)] = \frac{1}{\chi_c^2 x^2} \int_0^x dx' \rho(x') (x - x')^2 \sum_j \omega_j h_j(x') \times \left[\ln G_j(x') - \frac{F_j(x')}{Z_j(x')} \right] \quad (5)$$

em que,

$$F_j(x') = \ln \left[1130 Z_j^{-\frac{4}{3}}(x') \left(\frac{\beta(x')}{1 - \beta^2(x')} \right)^2 \right] - u_j - \frac{1}{2} \beta^2(x') \quad (6)$$

$$G_j(x') = \left(\frac{m}{M} \frac{\alpha}{0.8853} \right)^2 k_{HF} \left[1.13 + 3.76 \left(Z_j(x') \frac{\alpha}{\beta(x')} \right)^2 \right] \frac{Z_j^{\frac{2}{3}}(x')}{\tau(x') [\tau(x') + 2]} \quad (7)$$

Nas equações 6 e 7 aparecem u_j e k_{HF} que são parâmetros de correção e α é a con-

stante de estrutura fina, determinados na literatura. O parâmetro $\beta(x')$ é a razão entre a velocidade do próton e a velocidade da luz.

Finalmente o ângulo calculado resultante da correção do ângulo característico de Moliere (θ_M) segue:

$$\theta_H = \theta_M \sqrt{1 - \frac{0.7}{B}} \quad (8)$$

Foi calculado θ_H para profundidade de 0,5 *cm* até 20 *cm* com incremento 0,5 *cm*, como representado na figura 3. As energias utilizadas foram de 100 a 250 *MeV* com incremento de 10 *MeV*. No apêndice B é apresentado o código implementado para a realização do cálculo analítico no *software Wolfram Mathematica v7.0*.

4 Resultados e Discussão

4.1 Cálculo da Trajetória mais provável

Segue abaixo os resultados dos cálculos da trajetória mais provável de prótons em água utilizando o SRIM e o MCNPX e posteriormente o cálculo analítico da deflexão lateral do feixe.

As trajetórias mais prováveis dos prótons serão apresentados pelos gráficos da profundidade que corresponde ao eixo x , como mostra a Figura 3, em função do eixo y e z .

4.1.1 SRIM

Segue os resultados obtidos para as trajetórias mais prováveis de prótons para diferentes energias.

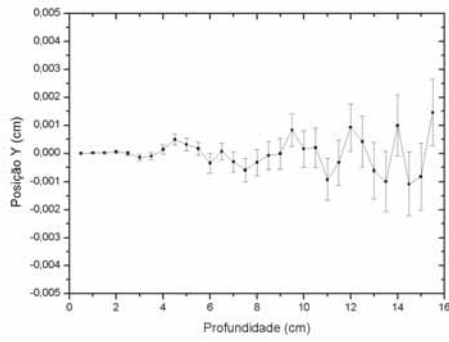
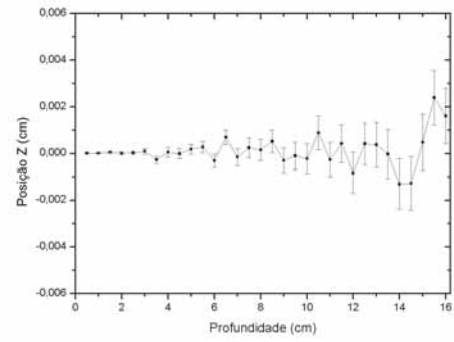
(a) Eixo y (b) Eixo z

Figura 5: Trajetória mais provável para prótons incidentes com 150 MeV.

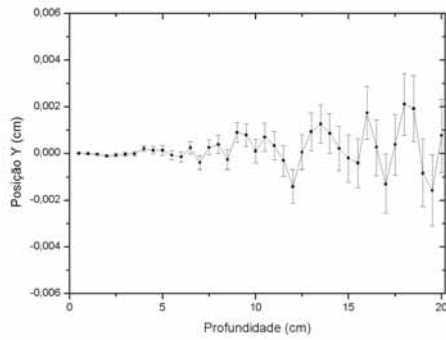
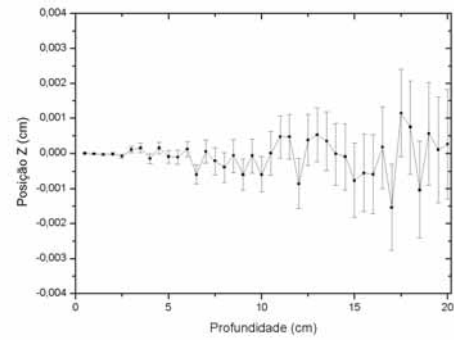
(a) Eixo y (b) Eixo z

Figura 6: Trajetória mais provável para prótons incidentes com 180 MeV.

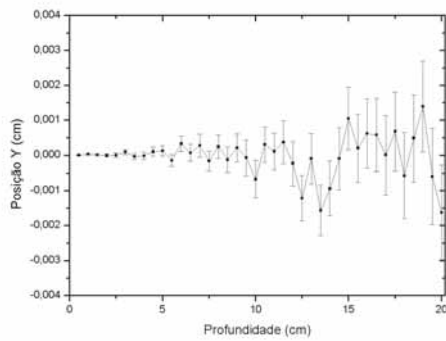
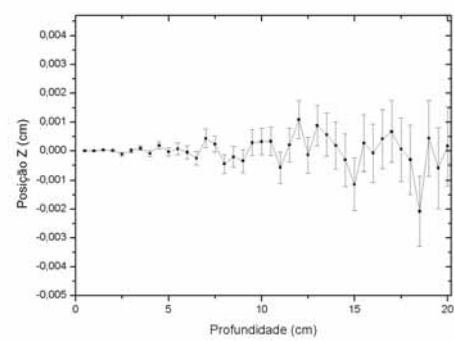
(a) Eixo y (b) Eixo z

Figura 7: Trajetória mais provável para prótons incidentes com 200 MeV.

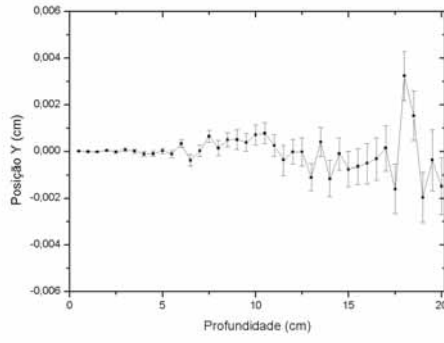
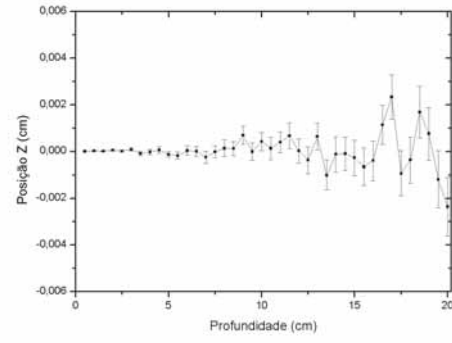
(a) Eixo y (b) Eixo z

Figura 8: Trajetória mais provável para prótons incidentes com 230 MeV.

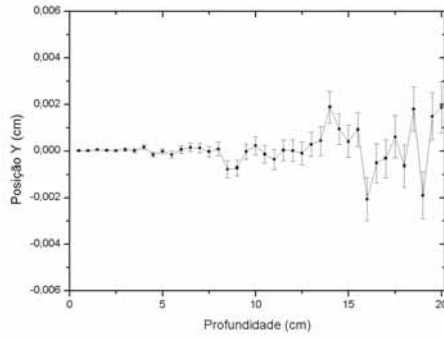
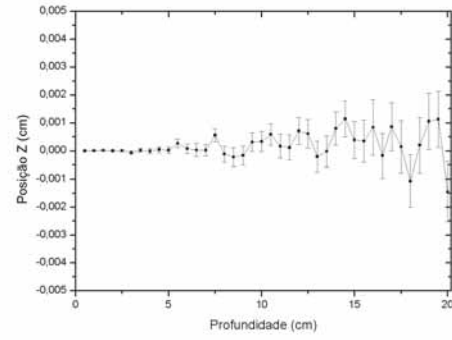
(a) Eixo y (b) Eixo z

Figura 9: Trajetória mais provável para prótons incidentes com 250 MeV.

Ao comparar a Figura 5 com a Figura 9, para uma mesma profundidade, 4 *cm* por exemplo, se observa que a amplitude de espalhamento para energia de 250 *MeV* é menor à de 150 *MeV*. Portanto, houve a diminuição do espalhamento com o aumento da energia incidente dos prótons.

Com o aumento da energia cinética, a interação das partículas incidentes diminuem e também há a diminuição da secção de choque envolvida, resultando na diminuição do espalhamento do feixe.

Nas profundidades próximas a 20 *cm* há um aumento do espalhamento para todas as energias dos feixes incidentes, pois nessa posição as energias dos feixes diminuíram como mostra a Figura 10 devido as colisões com o meio. Com uma energia cinética menor, há uma maior interação dos prótons com meio e também há um aumento na secção de choque do meio, com isso aumenta a probabilidade de interação dos prótons com o meio o que resulta em um maior espalhamento para profundidades maiores.

Abaixo segue o gráfico da energia em função da profundidade para cada feixe incidente a fim de observar o como se dá perda de energia.

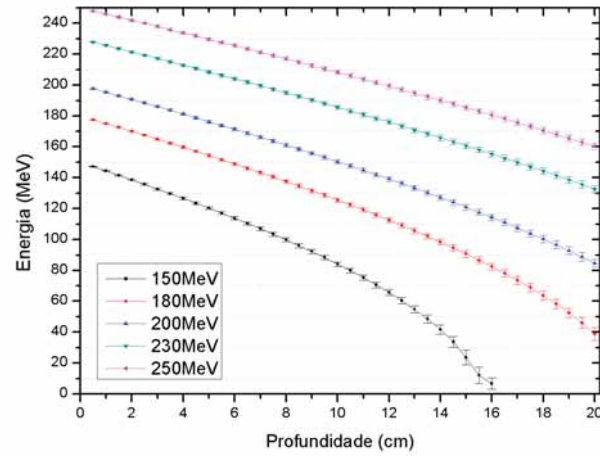
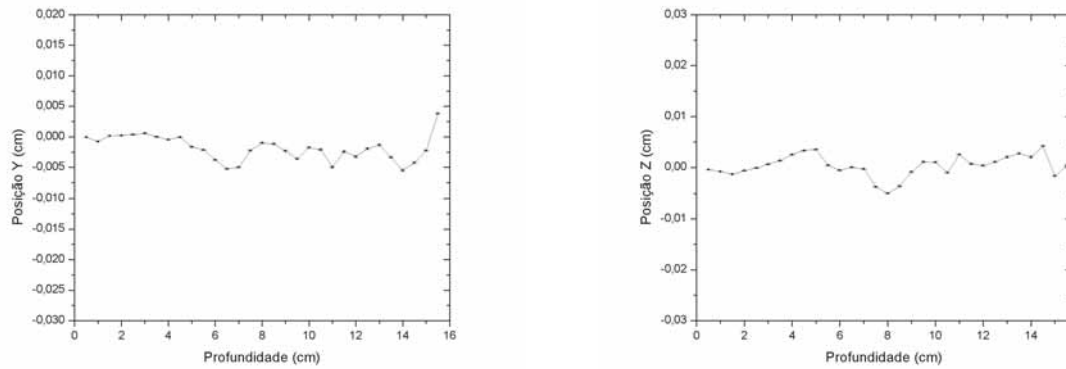


Figura 10: Comportamento da energia em função da profundidade obtido pelo SRIM, realizado para diferentes energias dos feixes incidentes.

4.1.2 MCNPX

Segue os resultados obtidos para as trajetórias mais prováveis de prótons para diferentes energias.



(a) Eixo y

(b) Eixo z

Figura 11: Trajetória mais provável para prótons incidentes com 150 MeV.

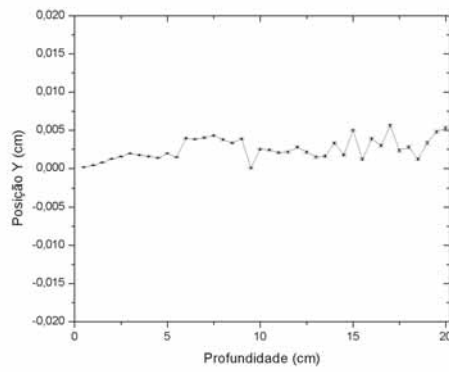
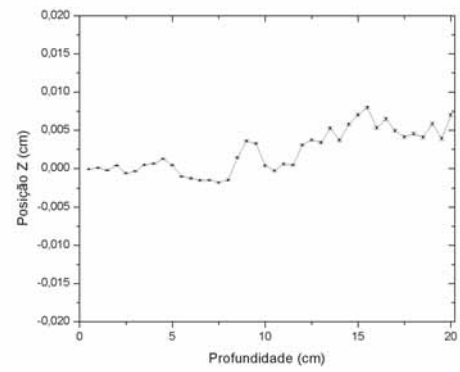
(a) Eixo y (b) Eixo z

Figura 12: Trajetória mais provável para prótons incidentes com 180 MeV.

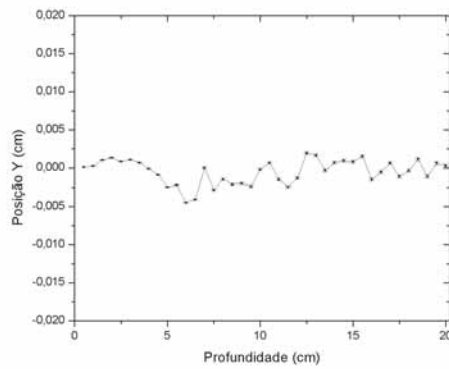
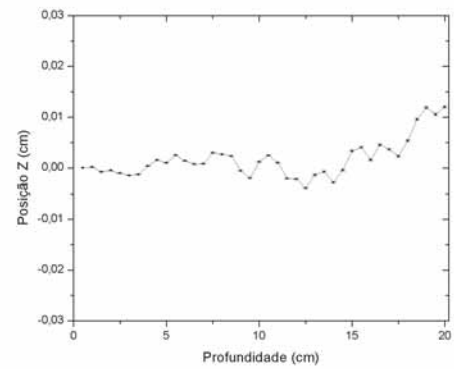
(a) Eixo y (b) Eixo z

Figura 13: Trajetória mais provável para prótons incidentes com 200 MeV.

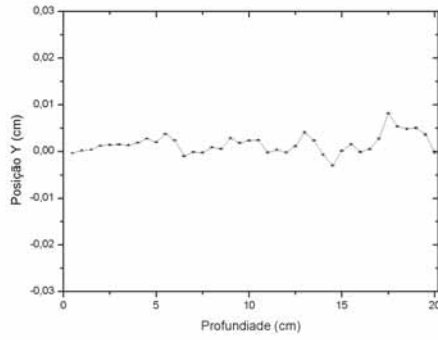
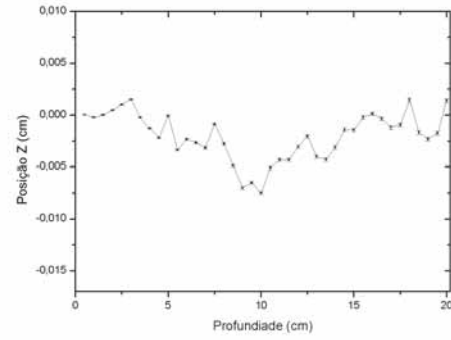
(a) Eixo y (b) Eixo z

Figura 14: Trajetória mais provável para prótons incidentes com 230 MeV.

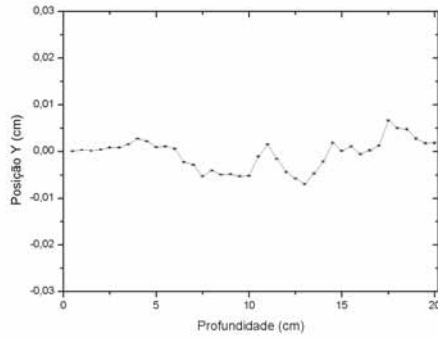
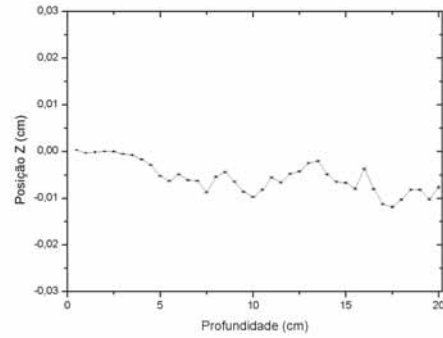
(a) Eixo y (b) Eixo z

Figura 15: Trajetória mais provável para prótons incidentes com 250 MeV.

Nas trajetórias obtidas com o MCNPX não se observa, diferente do SRIM, o aumento do espalhamento com o aumento da profundidade. Mesmo para pequenas profundidades há um grande espalhamento dos prótons, isso ocorre devido ao fato do MCNPX considerar as interações nucleares, formando prótons secundários.

Para pequenas profundidades, a energia do feixe incidente é maior como mostra a Figura 16, desse modo há um maior número de partículas secundárias sendo formadas. Estas partículas ao se formarem podem sair do átomo alvo e se deslocar para uma região diferente da direção do feixe incidente, ou seja, numa região aleatória. Esse tipo de evento ocorrente interfere no cálculo da média da posição dos 10^7 prótons.

A medida que aumenta a profundidade os prótons secundários são absorvidos pelo meio, porém os prótons primários, para profundidades maiores, sofrem maiores desvios.

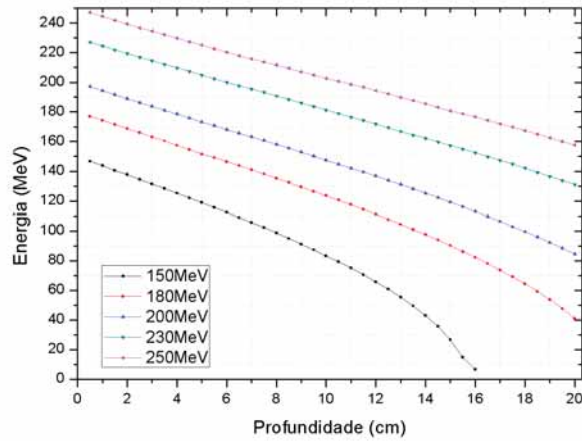


Figura 16: Comportamento da energia em função da profundidade obtido pelo MCNPX, realizado para diferentes energias dos feixes incidentes.

A pequena barra de erro é devido a realização dos cálculos com um grande número de eventos, porém o desvio padrão do MCNPX é maior em relação ao SRIM devido as interações nucleares. A Figura 17 demonstra o desvio padrão para 250 *MeV* nos eixos *y* e *z*.

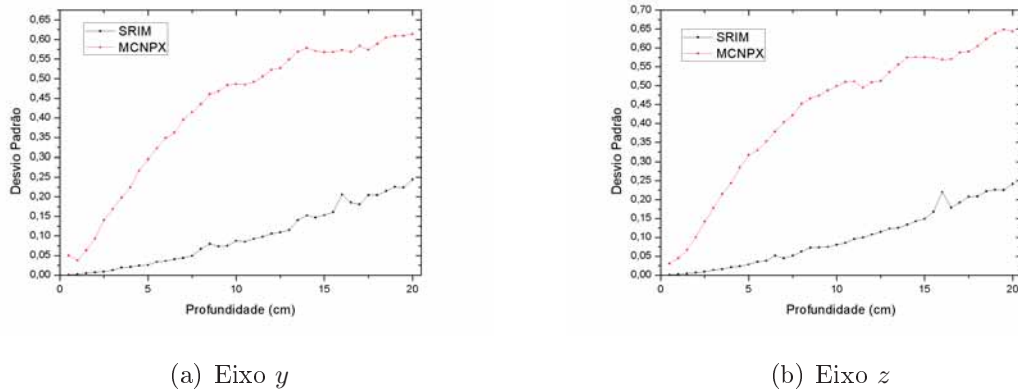


Figura 17: Desvio padrão 250 *MeV* realizados no MCNPX e SRIM.

4.2 Cálculo do Ângulo de deflexão lateral do feixe

4.2.1 SRIM

Pela saída de dados do SRIM, se obteve também os ângulos de deflexão com relação ao eixo *x* em função da profundidade:

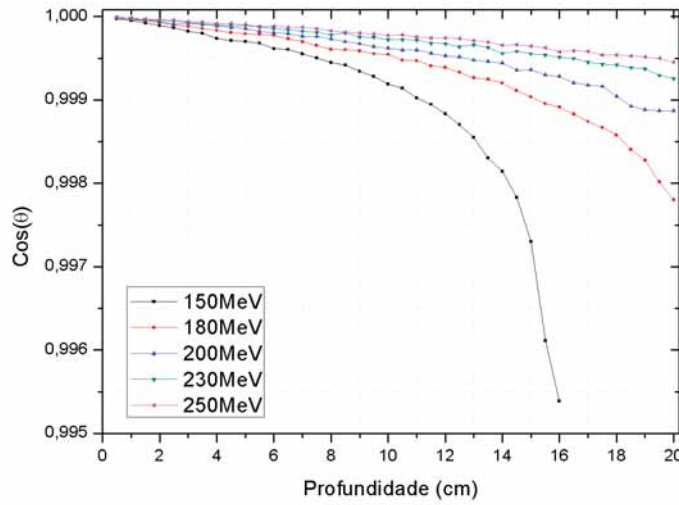


Figura 18: Variação dos ângulos para diferentes energias em função da profundidade.

Analizando o gráfico acima, percebe-se que o ângulo de deflexão aumenta em função da profundidade conforme o esperado. Isso se deve ao fato do aumento do espalhamento com a diminuição da energia como discutido antes.

Quanto menor a energia incidente do feixe, fixando uma determinada profundidade, maior o ângulo de deflexão.

4.2.2 MCNPX

Com base na saída de dados do MCNPX, foi realizado também a relação do ângulo de deflexão em função da profundidade, apresentado na Figura 19.

Pela Figura 19, percebe-se que o ângulo de deflexão dos feixes a diferentes energias não apresentam uma ordem estabelecida como os ângulos obtidos com o SRIM (Figura 18). Isso se deve ao fato do MCNPX levar em consideração as interações nucleares.

Quando prótons incidem com uma energia maior que a energia de ligação dos nucleons, os prótons rompem esta, fazendo com que os nucleons (podendo ser prótons) sejam lançados do núcleo. Esses prótons secundários, ao sair do núcleo do átomo que compõem o meio, possuem uma distribuição estocástica dos ângulos de deflexão. Este fato, faz com que a média dos ângulos de espalhamento considere os prótons primários e secundários.

Para energia de 250 *MeV* é nítido o grande aumento dos ângulos em função da profundidade e posteriormente uma diminuição destes. Essa é uma energia relativamente alta, fazendo com que haja mais reações nucleares do feixe incidente com os átomos do meio e, assim, a média do ângulo de espalhamento cresça rapidamente. Após isso, para uma

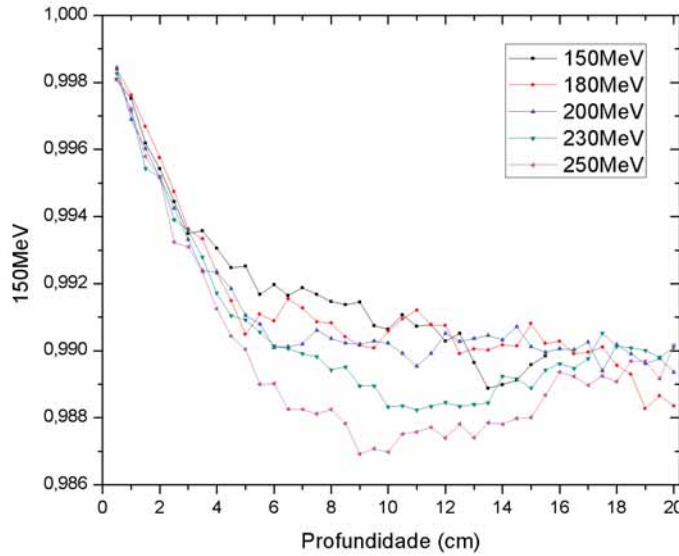


Figura 19: Variação dos ângulos para diferentes energias em função da profundidade.

profundidade aproximada de 13 *cm* há uma diminuição na média do ângulo devido a absorção dos prótons secundários pelo meio.

4.2.3 Cálculo Analítico

Na figura 20 é apresentado o alcance como função da energia em água para prótons no intervalo de energia objeto de estudo neste trabalho (100 – 250 *MeV*). Esses valores foram obtidos a partir da base de dados do *National Institute of Standards and Technology* (NIST) [17] e serviram como referência para definir o tamanho do alvo para cada energia. Essa espessura total foi adotada com um valor menor que 7,7 *cm* para 100 *MeV* e foi variado de forma suave para cada energia até um valor menor que 37,9 *cm* para 250 *MeV*.

Com esta informação foi calculado o ângulo de deflexão em função da profundidade para energia de 100 a 250 *MeV* com incremento de 10 *MeV*. Este resultado aparece reportado na Figura 21.

Através dos gráficos observa um comportamento que já era esperado para a deflexão lateral do feixe de prótons. Conforme há o aumento da profundidade, há o aumento do ângulo de deflexão lateral, pois diminui a energia disponível para o próton aumentando, consequentemente, a probabilidade de interação dos prótons no meio.

Comparando-se o comportamento das variações dos ângulos para cada energia, observa-se que para uma mesma profundidade o ângulo de deflexão aumenta com a diminuição da

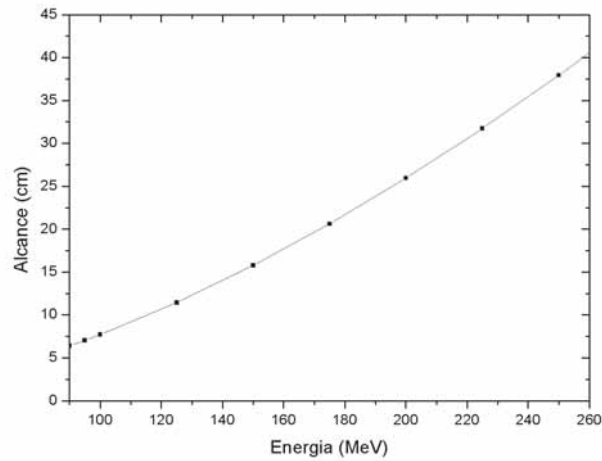


Figura 20: Gráfico do alcance em função do alcance do feixe.

energia do feixe incidente, o que também já era esperado. Este comportamento também se deve ao fato de que o espalhamento do feixe incidente aumenta com a diminuição da energia inicial.

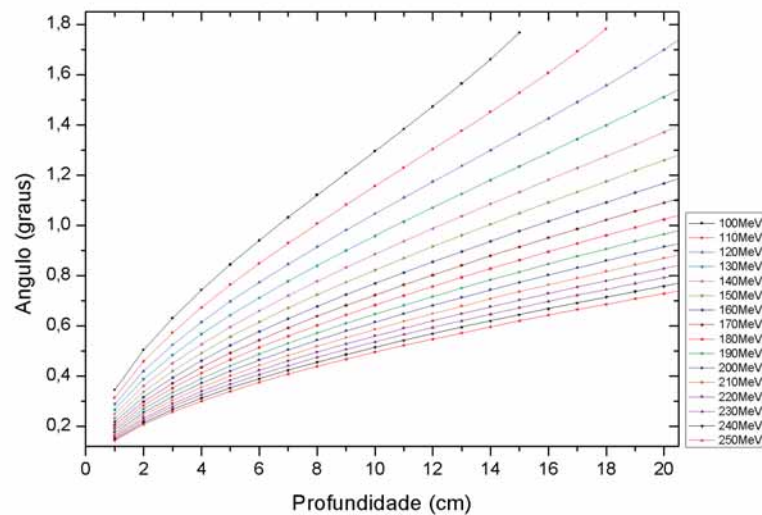


Figura 21: Gráfico do cálculo analítico para o ângulo (graus) de deflexão em função da profundidade (cm).

Observa-se, portanto, pela Figura 21 que para cada energia os ângulos aumentam de forma suave com o aumento da profundidade, havendo uma relação de proporcionalidade entre ângulo e energia incidente: com o aumento da energia diminui o ângulo. Esta relação

fica mais evidente com o aumento da profundidade.

Abaixo segue o gráfico do cálculo analítico da deflexão alterando-se o eixo da ordenada para $\text{Cos}(\theta)$ a fim de melhor comparar com as Figuras 18 e 19.

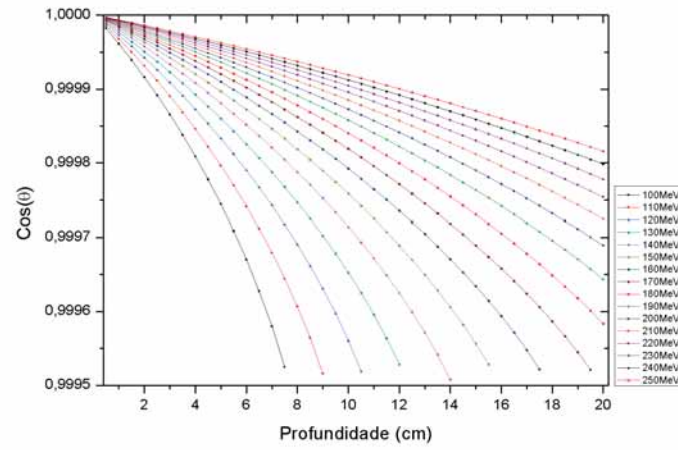


Figura 22: Gráfico do cálculo analítico para o Cosseno do ângulo de deflexão em função da profundidade (cm).

5 Conclusão

Os cálculos das trajetórias mais provável de prótons em água foram obtidos com diferentes programas que têm por base o método de Monte Carlo. Esses resultados mostraram-se diferentes devido ao tipo de interação atômico e nuclear que foram considerados. O SRIM considera interações elásticas com os átomos do alvo e o MCNPX considera interações inelásticas e nucleares.

Os cálculos realizados com o MCNPX consideraram, tanto para a trajetória quanto para o ângulo de deflexão, prótons primários e secundários. O ideal seria separar esses prótons para a análise, isso será considerado futuramente.

Os cálculos analíticos dos ângulos de deflexão baseados na teoria de espalhamento a baixo ângulo (Teoria de Moliere), correspondem a um comportamento esperado.

Todos esses dados obtidos fazem parte de um banco de dados que serão utilizados para outros estudos futuros.

6 Trabalhos apresentados

Parte dos resultados deste trabalho foram apresentado nos eventos que seguem:

1. IV Congresso de Física Aplicada à Medicina, 2007, Botucatu-SP, com o trabalho intitulado *Estudo da trajetória mais provável para Prótons em materiais de interesse Biológico e sua Aplicação em tomografia com Prótons*. Apresentado sob a forma de pôster pelos alunos de iniciação científica: Maurício T. Pazianotto, Danilo Anacleto A. da Silva, Guilherme F. Inocente.
2. IV Congresso de Física Aplicada à Medicina, 2008, Botucatu-SP, com o trabalho intitulado *Estudo dos Efeitos da Interação Nuclear Inelástica na Trajetória de Prótons em Água*. Apresentado sob a forma de pôster pelos alunos de iniciação científica: Maurício T. Pazianotto, Danilo Anacleto A. da Silva, Guilherme F. Inocente.
3. XXXI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2008, Águas de Lindóia-SP, com o trabalho intitulado *Estudo da Trajetória mais Provável para Prótons em materiais de interesse Biológico e sua Aplicação em tomografia com Prótons*. Apresentado sob a forma de pôster pelos alunos de iniciação científica: Danilo Anacleto A. da Silva, Guilherme F. Inocente, Maurício T. Pazianotto.
4. VII Workshop da Pós-Graduação, 2009, Botucatu-SP, com o trabalho intitulado *Cálculo Analítico da Deflexão Lateral de Feixe de Próton em Alvos Homogêneos*. Apresentado sob a forma de pôster pelos alunos de iniciação científica: Danilo Anacleto A. da Silva, Maurício T. Pazianotto, Guilherme F. Inocente.
5. VII Workshop da Pós-Graduação, 2009, Botucatu-SP, com o trabalho intitulado *Cálculo da Trajetória mais provável para prótons em materiais homogêneos e heterogêneos por simulação de Monte Carlo*. Apresentado sob a forma de pôster pelos alunos de iniciação científica: Maurício T. Pazianotto, Danilo Anacleto A. da Silva, Guilherme F. Inocente.
6. XXXII Reunião de Trabalhos de Física Nuclear no Brasil, 2009, Águas de Lindóia-SP, com o trabalho intitulado *Monte Carlo and Analytical Calculation of lateral deflection of proton beams in homogeneous targets*. Apresentado sob a forma de pôster pelos alunos de iniciação científica: Maurício T. Pazianotto, Danilo Anacleto A. da Silva, Guilherme F. Inocente.
7. XXXII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2009, Águas de Lindóia-SP, com o trabalho intitulado *Analytical calculation of proton lateral deflection in homogeneous targets*. Apresentado sob a forma de pôster pelos alunos de iniciação

- científica: Maurício T. Pazianotto, Danilo Anacleto A. da Silva, Guilherme F. Inocente.
8. XXXII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2009, Águas de Lindóia-SP, com o trabalho intitulado *Calculation of most likely trajectory of protons by Monte Carlo simulations*. Apresentado sob a forma de pôster pelos alunos de iniciação científica: Guilherme F. Inocente, Maurício T. Pazianotto, Danilo Anacleto A. da Silva.
 9. V Congresso de Física Aplicada à Medicina, 2009, Botucatu-SP, com o trabalho intitulado *Estudo da Contribuição do Espalhamento nuclear não Elástico de Prótons na dose depositada em alvos com composição homogênea*. Apresentado sob a forma de pôster pelos alunos de iniciação científica: Guilherme F. Inocente, Maurício T. Pazianotto, Danilo Anacleto A. da Silva, Marcos Felipe de Freitas Calabresi.
 10. V Congresso de Física Aplicada à Medicina, 2009, Botucatu-SP, com o trabalho intitulado *Modelo Teórico para o transporte de prótons em meios homogêneos descrito pela equação de Fokker-Planck*. Apresentado sob a forma de pôster pelos alunos de iniciação científica: Danilo Anacleto A. da Silva, Guilherme F. Inocente, Maurício T. Pazianotto, Marcos Felipe de Freitas Calabresi.
 11. V Congresso de Física Aplicada à Medicina, 2009, Botucatu-SP, com o trabalho intitulado *Modelo Teórico para a deflexão lateral do feixe de prótons usando as equações de Bethe-Block a diferentes meios*. Apresentado sob a forma de pôster pelos alunos de iniciação científica: Maurício T. Pazianotto, Guilherme F. Inocente, Danilo Anacleto A. da Silva, Marcos Felipe de Freitas Calabresi.
 12. V Congresso de Física Aplicada à Medicina, 2009, Botucatu-SP, com o trabalho intitulado *Análise da viabilidade de simulações com feixe de prótons de 150MeV em alvo heterogêneo*. Apresentado sob a forma de pôster pelos alunos de iniciação científica: Maurício T. Pazianotto, Guilherme F. Inocente, Danilo Anacleto A. da Silva, Marcos Felipe de Freitas Calabresi.
 13. XIV Congresso Brasileiro de Física Médica, 2009, São Paulo, com o trabalho intitulado *Cálculo Analítico de Espalhamento a baixo ângulo e sua aplicação em Tomografia com Prótons*. Apresentado sob a forma de pôster pelos alunos de iniciação científica: Maurício T. Pazianotto, Guilherme F. Inocente, Danilo Anacleto A. da Silva, Marcos Felipe de Freitas Calabresi.
 14. XIV Congresso Brasileiro de Física Médica, 2009, São Paulo, com o trabalho intitulado *Cálculo por simulação de Monte Carlo da deflexão lateral de feixe de prótons*

em alvos homogêneos. Apresentado sob a forma de pôster pelos alunos de iniciação científica: Maurício T. Pazianotto, Guilherme F. Inocente, Danilo Anacleto A. da Silva, Marcos Felipe de Freitas Calabresi.

15. XXI Congresso de Iniciação Científica, 2009, São José do Rio Preto-SP, com o trabalho intitulado *Formulação de Moliere para o cálculo analítico do ângulo de espalhamento do Feixe de Prótons em meio homogêneo*. Apresentado sob a forma de pôster pelos alunos de iniciação científica: Maurício T. Pazianotto, Guilherme F. Inocente, Danilo Anacleto A. da Silva, Marcos Felipe de Freitas Calabresi.
16. XXI Congresso de Iniciação Científica, 2009, São José do Rio Preto-SP, com o trabalho intitulado *Estudo da contribuição de espalhamento não elástico de prótons na dose depositada em alvos com composição homogênea*. Apresentado sob a forma de pôster pelos alunos de iniciação científica: Maurício T. Pazianotto, Guilherme F. Inocente, Danilo Anacleto A. da Silva, Marcos Felipe de Freitas Calabresi.

Referências

- [1] Smith AR. Proton therapy. *Phys Med Biol*. 2006; 51: 491-504.
- [2] Meikle J. How particles can be therapeutic. *Physics Web*. [Internet]. 2003. Available from: <http://physicsweb.org/article/word/16/8/9/1>.
- [3] Amaldi U. The importance of particle accelerators. *Europhys News*. 2000; 5: 31-6.
- [4] Amaldi U. Hadrontherapy in the world. Italy: University of Milano Bicocca and TERA Foundation; [sd].
- [5] Paganetti H, Bortfeld T. Proton beam radiotherapy: the state of the art. *New Technol Radiat Oncology*. 2005; 32: 2048.
- [6] Evseev I, Klock MCL, Paschuk SA, Schelin HR, Setti JAP, Lopes RT, et al. Computerized tomography with high-energy proton beams: tomographic image reconstruction from computer-simulated data. *Braz Jour Physics*. 2004; 34(3): 804-7.
- [7] Schulte RW, Bashkirov V, Li T, Liang Z, Mueller K, Heimann J, et al. Conceptual design of a proton computed tomography system for applications in proton radiation therapy. *IEEE Trans. Nucl. Sci*. 2004; 51:866.
- [8] Li T, Liang Z, Singanallur JV, Satogata TJ, Williams DC, Schulte RW. Reconstruction for proton computed tomography by tracing proton trajectories - A Monte Carlo study. *Med Physics*. 2006; 33(3): 699-706.
- [9] Sociedade Brasileira de Física, XVI Simpósio nacional de ensino em física [Internet]. Available from: <http://www.sbf1.sbfisica.org.br/eventos/snef/xvi/cd/resumos/T0664-1.pdf>.
- [10] Assis JT, Yevseyeva O, Evseev I, Lopes T, Shelin HR, Klock MC, et al. Proton computed tomography as a tool for proton therapy planning: preliminary computer simulations and comparisons with x-ray CT basics. *X-ray Spectrom*. 2005; 34(6): 481-92.
- [11] Ziegler JF. Stopping of energetic light ions in elemental matter. *J Appl Physics*. 1999; 85: 1249-72.
- [12] Pelowitz D. MCNPX User's manual version 2.5.0. Los Alamos: National Laboratory; 2005. Report LA-CP-05-0369.
- [13] Sobol IM. A primer for the Monte Carlo Method. 3rd ed. London: CRC Press; 1985.

- [14] Bielajew AF. Fundamentals of the Monte Carlo method for neutral and charged particle transport. United State of America: The University of Michigan; 2001. p. 1-1.
- [15] Gooley T. Criticality Calculations with MCNP5: A Primer. Los Alamos: National Laboratory; 2004. Report LA-UR-04-0294.
- [16] Ciangaru G, Polf JC, Bues M, Smith A. Benchmarking analytical calculations of proton doses in heterogeneous matter. Med Physics. 2005; 32(12): 3511-23.
- [17] National Institute of Standards and Technology, PSTAR Database [Internet]. Available from: <http://www.physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/contents.html>.

Apêndice

A Arquivo MCNPX

Um Exemplo de *File* de entrada do MCNPX usado no trabalho.

```
c Cell Card - Cilindro de agua bombardeado com protons de 200 MeV
  1 0 (-1 2:-3:4) imp:h 0
  2 1 -1 (-2 3 -4) imp:h 1
  3 0 1 imp:h 0
c Surface Card
  1 so 200
  2 cx 5
  3 px 0
  4 px 0.5
c Material - Agua
  m1 1001 0.667 8016 0.333
  mode h
  phys:h 200. j 0.
  lca: j j j
  cut:h j 0.001
  nps 10000000
c Definicao de fonte e PTRAC
  PRINT 110
  SDEF sur=3 erg=200 dir=1 vec=1 0 0 pos=-0 0 0 par=h
  PTRAC FILE=ASC WRITE=all EVENT=sur CELL=1 SURFACE=4
```

B Código implementado no *Mathematica v7.0*

```

H20 = List[10, 18, 75, -3.5, 0.0911, 3.48, 2.8, 0.24, 1.00];
profundidade = 20;
Na = 6.022*10^23;
NA = Na;
re = 2.8179*Power[10, -13]; (*Raio Clássico do Elétron*)
m = 9.10938188*Power[10, -31]; (*Massa do Elétron*)
M = 1.67262158*Power[10, -27]; (*Massa do Próton*)
ρ = 1; (*Densidade do Material*) (*Densidade água*)
α = 0.00729735253;
z = Table[i, {i, 0.5, profundidade, 0.5}];
Zj = 10; (*Número Atômico*)
Aj = 18; (*Massa atômica do elemento j*)
Moc2 = 931.5016; (*Energia de repouso para unidade de massa [MeV]*)
mec2 = 0.511; (*Energia de repouso do eletrôn [MeV]*)
Const = 0.1535; (*2*π*Na*re^2*mec2*) (*[MeV/g/cm²]*)
zion = 1;
γ[w_] := 1 + w / Moc2
β[w_] := Sqrt[γ[w]^2 - 1] / γ[w]
η[w_] := β[w] * γ[w]
s = mec2 / (H20[[2]] * Moc2);
Wmax[w_] := 2 * mec2 * η[w]^2 / (1 + 2 * s * Sqrt[1 + η[w]^2] + s^2) (*[MeV]*)
DRDX[w_] := Const * (H20[[1]] / H20[[2]]) * (zion^2 / β[w]^2) *
(Log[(2 * mec2 * γ[w]^2 * β[w]^2 * Wmax[w] * 10^12) / H20[[3]]^2 - 2 * β[w]^2] (*[MeV/g/cm²]*)
X[w_] := Log[10, β[w] * γ[w]]
S2[w_] := 4.6052 * X[w] + H20[[4]] + H20[[5]] * (H20[[6]] - X[w]) ^ (H20[[6]])
S3[w_] := 4.6052 * X[w] + H20[[4]]
ξ[w_] := If[X[w] < H20[[8]], 0, If[X[w] > H20[[7]], S3[w], S2[w]]]
c[w_] :=
(0.422377 * ((η[w])^-2) + 0.0304043 * ((η[w])^-4) - 0.00038106 * ((η[w])^-6)) * (10^-6) *
(H20[[3]])^2 + (3.85019 * ((η[w])^-2) - 0.1667989 * ((η[w])^-4) + 0.00157955 * ((η[w])^-6)) *
(10^-9) * (H20[[3]])^3
DRDXkor[w_] := Const * (H20[[1]] / H20[[2]]) * (zion^2 / β[w]^2) *
(Log[(2 * mec2 * (γ[w]^2) * (β[w]^2) * Wmax[w] * 10^12) / (H20[[3]]^2) -
2 * (β[w]^2) + (-ξ[w] - 2 * c[w] / H20[[1]])])
Wend = 2;
Wstart = 250;
Δw = 0.1; Δx = 0; j = 1;
as = Table[N[(Δx + (Δw / (DRDXkor[Wstart - (j - 1) * Δw])) * 10 * (1 / H20[[9]]))],
{j, 0, (Wstart - Wend) / 0.1 + 1, 1}];
sx = Table[Sum[as[[i]], {i, 1, k}], {k, 1, (Wstart - Wend) / 0.1 + 1}];
as2 = MatrixForm[%];
Print["Total:", " ", (Wstart - Wend) / 0.1 + 1, " ", valores]
as3 = Table[k, {k, Wstart, Wend, -0.1}];
Ajust = Table[(sx[[i]] / 10, as3[[i]]), {i, 1, (Wstart - Wend) / 0.1 + 1}];
MatrixForm[%];
quad = (Fit[Ajust, {1, x, x^2, x^3, x^4, x^5, x^6, x^7, x^8, x^9}, x]) / 938.272
(*Show[ListPlot[Ajust], Plot[quad, {x, 0, 250}]]*)
τ2[x_] = quad;
τ[z1_] = τ2[z1];
ωj = 1; (*Fração dos constituintes atômicos do material*)
V = (ρ * 4 * π * NA * re^2 * Zj^2 * m^2 / (Aj * M^2));
V2 = Table[NIntegrate[(τ[z1] + 1) / (τ[z1] * (τ[z1] + 2)))^2 * (1 - z1 / z[[i]])^2,
{z1, 0, z[[i]]}], {i, 1, 2 * profundidade}];

```

```

χc = Sqrt[V * V2];
uj = -5.8; (*Fator de Correção, dado no artigo*)
khf = 3.2 * Power[10, -3];
β2[z1_] := Sqrt[1 - (1 / (1 + τ[z1]) ^ 2)];
Fj = Log[1130 * Zj ^ (-4 / 3) * (β2[z1] / (1 - β2[z1] ^ 2)) ^ 2] - uj - (1 / 2) * β2[z1] ^ 2;
V3 = (m * α) / (M * 0.8853) ^ 2 * khf;
V4 = (1.13 + 3.76 * (Zj * α / β2[z1]) ^ 2);
V5 = Zj ^ (2 / 3) / (τ[z1] * (τ[z1] + 2));
Gj = V3 * V4 * V5;
Soma2 = ωj * 4 * Pi * NA * Power[re * (m / M) * ((τ[z1] + 1) / (τ[z1] * (τ[z1] + 2))), 2] *
  (Power[Zj, 2] / Aj) * (Log[Gj] - Fj / Zj);
χα = Table[Sqrt[Exp[(1 / (χc[[i]] * z[[i]]) ^ 2) *
  NIntegrate[ρ * (z[[i]] - z1) ^ 2 * Soma2, {z1, 0, z[[i]]}]], {i, 1, 2 * profundidade}];
B = Table[1.153 + 2.583 * Log[10, ((χc[[i]] / χα[[i]]) ^ 2)], {i, 1, 2 * profundidade}];
θm = Table[(1 / (Sqrt[2])) * χc[[i]] * Sqrt[B[[i]]], {i, 1, 2 * profundidade}];
θh = Table[θm[[i]] * Sqrt[1 - (0.7 / B[[i]])], {i, 1, 2 * profundidade}];
Ψ[x_, y_, z_] := Table[(1 / ((Sqrt[2 * Pi] * z[[i]] * θh[[i]]) ^ 2) *
  Exp[-(x ^ 2 + y ^ 2) / (2 * (z[[i]] * θh[[i]]) ^ 2))], {i, 1, 2 * profundidade}]
frt = 180 θh / π (*GRAUS*)
MAT = MatrixForm[frt] (*GRAUS*)
ListLinePlot[frt, Frame → True, Axes → False, Mesh → Full]

```