



Simulação de Monte Carlo aplicada a fluorescência de raios X em amostras biológicas a partir do código PENELOPE/PenEasy

Palavras-Chave: Fluorescência de raios X por energia dispersiva, Simulação Monte Carlo, Neurociência

Autores/as:

Ariel Monteiro Soares – Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

Prof. Dr. Jean Rinkel (orientador) – Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

INTRODUÇÃO:

A técnica de fluorescência de raios-X por energia dispersiva (EDXRF) é muito utilizada para a determinação de elementos químicos presentes em alguma amostra desconhecida a partir das interações dos raios-X com o material analisado e da comparação do espectro de energia detectado após a interação com espectros característicos de amostras padrões. Essa análise possui diversas aplicações, sendo uma delas o estudo de concentrações de elementos pré-determinados em amostras biológicas de cérebro de camundongo. Baseado nessa aplicação, o intuito desse trabalho foi, através de simulações de Monte Carlo, determinar o limite de detecção dos elementos ferro (Fe) e zinco (Zn), otimizar o experimento que analisa as concentrações destes elementos e analisar o espectro experimental em comparação com o espectro simulado.

METODOLOGIA:

O experimento e os estudos acerca do espalhamento - outro efeito da interação de radiação com a matéria – foram desenvolvidos pelos alunos Pedro de Azevedo Piquet Carneiro e Emmanuel Rodrigues Guimarães e seus resultados são utilizados de forma a atingir os objetivos propostos. Inicialmente, as simulações são executadas a partir de geometrias definidas do aparato experimental e com as amostras padrões de Fe e Zn em concentrações que variam de 1 a 1000 p.p.m., tanto em meio aquoso quanto em um meio mais próximo do tecido biológico – são previamente testados alguns meios gelatinosos de origem animal e vegetal. Os resultados das simulações são comparados com resultados obtidos experimentalmente e, desta forma, podem ser validados. São consideradas válidas as simulações se o valor de concentração obtido computacionalmente estiver dentro do intervalo de incerteza experimental do experimento executado sob as mesmas condições impostas no código PENELOPE/PenEasy.

Estudando os resultados da segunda fase deste projeto de pesquisa e uma melhor forma de obter resultados experimentais, além de levar em consideração o ângulo gerador-amostra-detector, as distâncias gerador-amostra, amostra-detector, a espessura da própria amostra, assim como as limitações do aparato experimental, são simuladas novas geometrias do mesmo experimento, em busca de alguma que seja capaz de minimizar as incertezas e os limites de detecção, e de maximizar o sinal gerado no detector. Os melhores resultados encontrados são verificados a partir do experimento. Caso haja discrepância entre os resultados experimentais esperados e os obtidos, pode haver uma reavaliação das simulações e/ou uma correção do

modelo usado para determinar as melhores geometrias a serem testadas a partir dos estudos bibliográficos até que os resultados esperados e obtidos sejam condizentes. Definida uma ou mais geometrias que gerem melhores resultados, são utilizadas outras amostras-padrão de concentrações intermediárias às utilizadas anteriormente para se desenvolver uma forma de análise de espectro experimental. Dado o espectro obtido experimentalmente numa geometria pré-determinada, são avaliadas duas maneiras de obter a concentração em p.p.m. dos elementos de interesse:

- A partir da simulação da mesma geometria com amostras de diferentes concentrações de Fe e Zn, as áreas sob os espectros gerado computacionalmente e detectado são normalizadas e a distância entre ambos espectros será analisada por canal. A proposta inicial é de que esta seja avaliada a partir da distância de Mahalanobis [4] visto que esta leva em consideração o desvio padrão de cada medida, ou seja, os canais com menos ruído terão maior relevância na análise. Dada uma concentração onde as distâncias sejam minimizadas, é então determinada a concentração mais provável dos elementos de interesse. Como são dois elementos, então será avaliada se a melhor forma é comparar o espectro de forma geral, ou individualmente as regiões dos picos de emissão do Fe e do Zn.
- Com os resultados obtidos dos experimentos das amostras-padrão iniciais, e com o experimento calibrado a partir destes resultados, são definidos dois ajustes por funções que descrevam graficamente a relação entre fluorescência por espalhamento e as concentrações em p.p.m. de Fe e Zn. A partir da função de ajuste dos pontos grafados e dos resultados experimentais de fluorescência por espalhamento das amostras-padrão que não foram utilizadas na calibração, são determinadas suas concentrações.

Analisados os resultados obtidos por ambas maneiras, é definida a melhor a partir dos valores obtidos e de suas incertezas e do quanto estes se sobrepõem ao valor obtido experimentalmente.

RESULTADOS E DISCUSSÃO:

Não houveram resultados para os objetivos propostos, pois a pesquisa foi encerrada antes do tempo previsto. Foram cumpridos apenas os estudos bibliográficos e as primeiras simulações em materiais homogêneos.

BIBLIOGRAFIA

[1] BARKLA, Charles Glover. XXXIX. The spectra of the fluorescent Röntgen radiations. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, v. 22, n. 129, p. 396–412, 1911. Disponível em: <<https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/14786440908637137>>.

[2] BONFILHO, Gustavo; FERREIRA, Squarizzi; RINKEL, Jean. Fluorescência de raios-X: comparação de métodos e aplicação à amostras biológicas. p. 36, 2018.

- [3] CHWIEJ, J.; KUTORASINSKA, J.; JANECZKO, K.; et al. Progress of elemental anomalies of hippocampal formation in the pilocarpine model of temporal lobe epilepsy-an X- ray fluorescence microscopy study. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, v. 404, n. 10, p. 3071–3080, 2012.
- [4] LLOVET, Xavier; VALOVIRTA, Eero; HEIKINHEIMO, Erkki. Monte Carlo simulation of secondary fluorescence in small particles and at phase boundaries. *Mikrochimica Acta*, v. 132, n. 2–4, p. 205–212, 2000.
- [5] MCLACHLAN, Geoffrey. Mahalanobis Distance. n. June, p. 20–26, 1999.
- [6] MOSELEY, H. G. J. The Number of β -Particles Emitted in the Transformation of Radium. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, v. 87, n. 595, p. 230–255, 1912.
- [7] OMAR, Artur; ANDREO, Pedro; POLUDNIOWSKI, Gavin. A model for the emission of K and L x rays from an x-ray tube. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, v. 437, n. October, p. 36–47, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2018.10.026>>.
- [8] PESSANHA, S.; MANSO, M.; ANTUNES, V.; et al. Monte Carlo simulation of portable XRF setup: Non-invasive determination of gold leaf thickness in indo-Portuguese panel paintings. *Spectrochimica Acta - Part B Atomic Spectroscopy*, v. 156, n. February, p. 1–6, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.sab.2019.04.006>>.
- [9] SALVAT, Francesc. PENELOPE, a Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport. n. July, p. 386, 2015. Disponível em: <<https://oecd-nea.org/science/docs/2011/nsc-doc2011-5.pdf>>
- [10] SILVA, M. P.; TOMAL, A.; PÉREZ, C. A.; et al. Determination of Ca, Fe, Cu and Zn and their correlations in breast cancer and normal adjacent tissues. *X-Ray Spectrometry*, v. 38, n. 2, p. 103–111, 2009.
- [11] SILVA, Marina P; SOAVE, Danilo F; RIBEIRO-SILVA, Alfredo; et al. Trace elements as tumor biomarkers and prognostic factors in breast cancer: a study through energy dispersive x-ray fluorescence. *BMC Research Notes*, v. 5, n. 1, p. 194, 2012. Disponível em: <<https://bmcrnotes.biomedcentral.com/articles/10.1186/1756-0500-5-194>>. Acesso em: 10 fev. 2020.

[12] TOMAL, A.; SANTOS, J. C.; COSTA, P. R.; et al. Monte Carlo simulation of the response functions of CdTe detectors to be applied in x-ray spectroscopy. *Applied Radiation and Isotopes*, v. 100, p. 32–37, 2015.

[13] YOSHIMURA, Elisabeth Mateus. Física das Radiações: interação da radiação com a matéria. *Revista Brasileira de Física Médica*, v. 3, n. 1, p. 57–67, 2009.

[14] ZHANG, Run; LI, Li; SULTANBAWA, Yasmina; et al. X-ray fluorescence imaging of metals and metalloids in biological systems. *American journal of nuclear medicine and molecular imaging*, v. 8, n. 3, p. 169–188, 2018. Disponível em: <<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/30042869>>. Acesso em: 5 nov. 2019.