UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FFCLRP - DEPARTAMENTO DE FÍSICA

JÉSSICA DE REZENDE GRAFF TINTI

**Estudo por simulação Monte Carlo de imagens
geradas por radiação espalhada**

Ribeirão Preto - SP
2018

JÉSSICA DE REZENDE GRAFF TINTI

**Estudo por simulação Monte Carlo de imagens
geradas por radiação espalhada**

Dissertação apresentada à Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo, como parte das exigências para a obtenção do título de Mestre em Ciências.

Área de Concentração:

Física aplicada à Medicina e Biologia.

Orientador:

Martin Eduardo Poletti.

Versão corrigida

Versão original disponível na FFCLRP-

Ribeirão Preto - SP

2018

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

FICHA CATALOGRÁFICA

Tinti, Jéssica de Rezende Graff

Estudo por simulação Monte Carlo de imagens geradas por radiação espalhada / Jéssica de Rezende Graff Tinti; orientador Martin Eduardo Poletti. Ribeirão Preto - SP, 2018.

86 f.:il.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-graduação em Física aplicada à Medicina e Biologia) - Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo, 2018.

1. Perfil de espalhamento . 2. Difração de raios X dispersivo em energia. 3. Simulação Monte Carlo. 4. Imagem planar.

Nome: TINTI, Jéssica de Rezende Graff

Título: Estudo por simulação Monte Carlo de imagens geradas por radiação espalhada

Dissertação apresentada à Faculdade de Filosofia,
Ciências e Letras de Ribeirão Preto da
Universidade de São Paulo, como parte das
exigências para a obtenção do título de Mestre em
Ciências.

Aprovado em: ____/____/____.

Banca Examinadora

Prof. Dr. : _____ Instituição: _____

Julgamento: _____ Assinatura: _____

Prof. Dr. : _____ Instituição: _____

Julgamento: _____ Assinatura: _____

Prof. Dr. : _____ Instituição: _____

Julgamento: _____ Assinatura: _____

Agradecimentos

Este trabalho foi desenvolvido graças a todos aqueles que contribuíram para a minha jornada acadêmica e pessoal.

Sou grata à Deus por ter me dado saúde e sabedoria. Pela oportunidade de me graduar no curso de física médica pela Universidade Federal de Uberlândia (UFU), e também cursar o mestrado na Universidade de São Paulo (USP), ambas consideradas universidades de excelência.

Agradeço a minha amada mãe, Andréa, e padrasto, Oscar, por todo o amor e suporte que me concederam ao longo de toda a minha vida;

A meu irmão, Andrei, por todo o companheirismo e irmandade;

Aos meus avós, Neide e Osmar, por todo o cuidado e ensinamentos ao longo da minha vida;

Ao meu esposo, Tiago, pelo amor, cuidado, companheirismo, incentivo, e por fazer parte da minha vida;

Ao meu orientador Professor Dr. Martin Eduardo Poletti, pela orientação, aprendizado e paciência;

Ao técnico Eldereis por todo auxílio durante as medidas experimentais;

Aos meus amigos de laboratório, em especial a Júlio, Beatriz, Michel e Leonardo pela troca de conhecimento, companheirismo e ajuda ao longo desses anos;

As minhas companheiras de apartamento, Natália, Tábata e Vanessa, por todo suporte e amizade.

Aos professores do curso de graduação em Física Médica pela Universidade Federal de Uberlândia, e de pós-graduação em Física Aplicada à Medicina e Biologia, do Departamento de Física e Matemática da Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto, que contribuíram para minha formação.

Aos funcionários da secretaria do Departamento de Física.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPQ) pela bolsa de mestrado concedida;

A todos que, de alguma forma, contribuíram direta ou indiretamente para este trabalho.

Resumo

TINTI, Jéssica R G **Estudo por simulação Monte Carlo de imagens geradas por radiação espalhada.** 2018. 86 f. Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-graduação em Física aplicada à Medicina e Biologia) - Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto - SP, 2018.

O câncer de mama é o tipo de câncer mais frequente entre as mulheres, sendo a mamografia a técnica mais utilizada para sua detecção. No entanto, essa técnica possui algumas limitações, como o baixo contraste, o qual pode ser associado, dentre outros fatores, a radiação espalhada. Apesar desse fato, novas técnicas baseadas na detecção do espalhamento vêm sendo empregadas em um vasto campo de aplicação, como na caracterização de materiais e tecidos biológicos. Há na literatura diversos estudos sobre perfil de espalhamento para a caracterização de tecidos mamários, porém ainda são poucos os estudos sobre imagem por espalhamento de mama e de otimização de contraste. Além disso, essas imagens são realizadas apenas em pequenas amostras de mama. Uma das possibilidades para o estudo de mamas de dimensões reais é a aplicação do método Monte Carlo (MC). Neste trabalho, foi estudado e otimizado um sistema de difração de raios X dispersivo em energia (SDRXDE) para medidas de perfis de espalhamento e um sistema para formação de imagens por espalhamento utilizando estas informações. O SDRXDE foi caracterizado experimentalmente, analiticamente e por simulação Monte Carlo, enquanto que o segundo sistema foi caracterizado analiticamente e por simulação Monte Carlo. Os resultados obtidos mostraram que as principais correções para o SDRXDE foram auto-atenuação, o espectro incidente, eficiência de detecção e múltiplo espalhamento. Outro fator importante que afeta o perfil de espalhamento resultante é a resolução de momento do sistema, o qual depende dos parâmetros geométricos (abertura dos colimadores, distâncias, ângulo de espalhamento e espessura da amostra) e da resolução de energia do detector. Os resultados para o

sistema de imagem mostram claramente a capacidade dessas imagens na detecção de um nódulo no interior da mama. A respeito da otimização das condições de irradiação da mama e detecção da radiação espalhada, os resultados alcançados demonstram a viabilidade experimental da geração destas imagens num ambiente clínico.

Palavras-chave: 1. Perfil de espalhamento . 2. Difração de raios X dispersivo em energia. 3. Simulação Monte Carlo. 4. Imagem planar.

Abstract

TINTI, Jéssica R G **Monte Carlo simulation of images generated by scattered radiation.** 2018. 86 f. Dissertation (M.Sc. - Postgraduate program in Physics applied to Medicine and Biology) - Faculty of Philosophy, Sciences and Literature, University of São Paulo, Ribeirão Preto - SP, 2018.

Breast cancer is the most frequent type of cancer among women, being mammography the technique more used for its detection. However, this technique presents some limitations, such as low contrast, which may be associated with scattered radiation. Thus, new scattering detection techniques have been employed in different fields such as characterization of biological materials and tissues, such as characterization of scattering profile for breast tissue, although there are still few studies on breast image and contrast optimization. Moreover, the images are originated from small breast samples. In this context, one of the possibilities for the study of actual breast dimensions is the application of the Monte Carlo method. Thus, this work studied optimized an energy X ray diffraction system (EDXRD) for measures of scattering profile and developed a system for imaging using this information. The EDXRD system was studied and optimized by experimentally, analytically and Monte Carlo simulation, while the image system was studied analytically and simulated by Monte Carlo. The results showed that the main corrections for the EDXRD system are self-attenuation, incident spectrum, detection efficiency and multiple scattering. Another important factor that affects scattering profile is the system momentum resolution, which depends on geometric parameters (collimator aperture, distances, scattering angle and sample thickness) and detector energy resolution. The results for the imaging system showed that a nodule could be detected within the breast. Finally the optimizations of breast radiation conditions and radiation detection showed the viability of generating experimental scattering images in clinical environment.

Key-words: 1. Scattering profile. 2. Energy dispersive X ray diffraction. 3. Monte Carlo Simulation 4. Planar image.

Lista de Abreviaturas

CSR	Camada semirredutora (<i>Half-value layer</i>).
FOM	Figura de mérito (<i>Figure of Merit</i>).
FWHM	Largura à meia altura (<i>Full width at half maximum</i>).
MAI	Modelo atômico independente (<i>Independent atomic model</i>).
MC	Monte Carlo (<i>Monte Carlo</i>).
PENELOPE	Penetração e Perda de Energia de Pósitrons e Elétrons (<i>Penetration and Energy Loss of Positrons and Electrons</i>).
SDRXDA	Sistema de difração de raios X dispersivo em ângulo (<i>Angular Dispersive X-ray Diffraction System</i>).
SDRXDE	Sistema de difração de raios X dispersivo em energia (<i>Energy Dispersive X-ray Diffraction System</i>).

Lista de Símbolos

ϕ	Abertura dos colimadores.
θ	Ângulo de espalhamento.
A	Auto-atenuação.
λ	Comprimento de onda.
C_s	Contraste dos fótons espalhados.
ε_{s1}	Distribuição radial da energia espalhada com o material de interesse.
ε_{s2}	Distribuição radial da energia espalhada sem o material de interesse.
ξ	Eficiência de detector.
N_0	Espectro incidente.
t	Espessura da amostra.
N_e	Fontes espúrias.
f	Largura do feixe incidente.
$C_{s,máx}$	Máximo contraste dos fótons espalhados.
χ	Momento transferido.
MS	Múltiplo espalhamento.
N^D	Número de fótons espalhados detectados.
μ_s	Perfil de espalhamento.
$\Delta\chi$	Resolução de momento.

Sumário

Lista de Abreviaturas	ix
Lista de Símbolos	x
1 Introdução	1
2 Fundamentos Teóricos	7
2.1 Anatomia da mama	7
2.2 Produção de raios X	8
2.2.1 Radiação Bremsstrahlung	9
2.2.2 Radiação Característica	10
2.3 Interação da Radiação com a Matéria	11
2.3.1 Efeito fotoelétrico	11
2.3.2 Espalhamento elástico	12
2.3.2.1 Espalhamento elástico por elétron livre	12
2.3.2.2 Espalhamento elástico por elétron ligado	12
2.3.3 Espalhamento inelástico	15
2.3.3.1 Espalhamento inelástico por elétron livre	16
2.3.3.2 Espalhamento inelástico por elétron ligado	17
2.4 Coeficiente de atenuação linear	17
3 Materiais e Métodos	19
3.1 Caracterização de um SDRXDE	19
3.1.1 Arranjo experimental para um SDRXDE	19
3.1.2 Obtenção do perfil de espalhamento (μ_S)	21
3.1.2.1 Fatores de correção	22
3.1.2.2 Borrimento intrínseco	26
3.1.2.3 Otimização do borrimento de um SDRXDE	30
3.2 Caracterização de um sistema de imagem por espalhamento	30

3.2.1	Quantificação analítica da intensidade espalhada de 1º ordem	30
3.2.2	Metodologia envolvida na simulação	36
3.2.3	Geração de imagens otimizadas	37
4	Resultados e Discussões	39
4.1	Caracterização de um SDRXDE	39
4.1.1	Correções para obtenção de μ_s	39
4.1.1.1	Espalhamento múltiplo	39
4.1.1.2	Correção por auto-atenuação	40
4.1.1.3	Correção pelo espectro incidente	41
4.2	Obtenção do μ_s	41
4.2.1	Borramento geométrico	42
4.2.1.1	Medidas experimentais	42
4.2.1.2	Validação do algoritmo	43
4.2.1.3	Influência dos fatores no borramento geométrico . . .	43
4.2.1.4	Otimização do borramento em um SDRXDE	44
4.3	Obtenção de imagem por espalhamento através de simulação MC . .	46
4.3.1	Otimização analítica do contraste de primeira ordem	46
4.3.1.1	Influência da energia do feixe monoenergético	47
4.3.1.2	Influência do feixe polienergético	48
4.3.1.3	Influência da distância amostra-detector	49
4.3.2	Imagem otimizada	51
5	Conclusão e Perspectivas	65
5.1	Conclusão	65
5.2	Perspectivas	65
	Referências	67

1 *Introdução*

O câncer de mama é o tipo de câncer de maior incidência na população feminina mundial e brasileira, exceto pelos casos de câncer de pele não melanoma, respondendo por cerca de 28% dos novos casos a cada ano. Detectá-lo precocemente traz melhores resultados no tratamento e ajuda a reduzir a taxa de mortalidade [1]. O exame de rotina recomendado para sua detecção precoce é a mamografia, porém a confirmação de câncer de mama é feita em laboratório pelo exame histopatológico que analisa uma pequena parte retirada da lesão (biópsia) [1]. Atualmente a mamografia é considerada a ferramenta de triagem mamária mais eficaz na detecção de câncer de mama [2].

Em um exame mamográfico a imagem é formada pela fração de raios X transmitida através da mama que incide sobre o receptor de imagem [3, 4]. Em comum com muitas técnicas de rastreo, a mamografia não é nem 100% sensível, nem 100% específica, uma vez que alguns diagnósticos falso-negativos e falso-positivos ocorrem, o que resulta em um diagnóstico errôneo levando a não detecção do carcinoma ou até mesmo a biopsias desnecessárias [2, 5]. Este fato é ocasionado pelo baixo contraste entre o tecido mamário saudável e doente, devido à pequena diferença nas propriedades de atenuação dos tecidos mamários e à ocorrência de radiação espalhada, acarretando em uma diminuição entre os diferentes tons de cinza presentes na mamografia, diminuindo assim a detectabilidade do exame [6–8].

Diversos autores investigaram sobre o potencial do perfil de espalhamento na classificação de materiais em diversos campos de aplicação como: meio de inspeção de segurança [9–15], e na caracterização de materiais e de tecidos biológicos [16–21].

Kosanetzky et al [16] utilizando um difractômetro de raios X com ânodo de cobre ($K\alpha=6,935$ keV), apresentaram medidas do perfil de espalhamento para água, vários materiais plásticos equivalentes e tecidos biológicos extraídos de animais suínos. Foram observadas diferenças entre os perfis de espalhamento dos tecidos de diferentes órgãos.

Evans et al [17] utilizando um tubo de raios X de 60 kVp, mediram o perfil de espalhamento para 19 amostras de tecido mamário, sangue e três materiais tecido-equivalentes. Tabularam as posições do pico principal de espalhamento e o valor da largura à meia altura de cada tipo de amostra, observando grande diferença na largura dada pela distribuição entre os perfis de tecido adiposo e fibroglandular, e pequenas diferenças entre o tecido fibroglandular e carcinoma.

Kidane et al [2] mediram os perfis de espalhamento de tecidos mamários através de um sistema de difração de raios X dispersivo em energia usando um tubo de raios X com ânodo de tungstênio, operando em 80kVp ($K\alpha=58,86$ keV), em uma faixa de momento transferido (χ) entre 0,7 e 3,5 nm^{-1} . Os resultados obtidos foram comparados com análises histológicas das amostras medidas. Foi observado que os tecidos mamários podem ser caracterizados através da forma do espectro espalhado e através da intensidade relativa, apresentando maiores diferenças na faixa de χ de 0,1 à 1,8 nm^{-1} .

Poletti et al [20] mediram o perfil de espalhamento elástico de tecidos mamários normais e neoplásicos utilizando tubos de raios X com ânodo de cobalto ($K\alpha=6,93$ keV) e molibdênio ($K\alpha=17,44$ keV). Os resultados mostravam diferenças consideráveis entre os tecidos mamários e os materiais tecido-equivalentes à baixos ângulos. Diferenças entre os tecidos normais e neoplásicos também foram observadas. Posteriormente os mesmo autores [22], obtiveram também o fator de forma e o coeficiente de atenuação linear para esses tecidos e materiais.

Pani et al. [23] utilizaram um sistema de tomografia computadorizada por difração de raios X dispersivo em energia de para caracterização de tecido mamário. Eles compararam os perfis de espalhamento dos tecidos com sua classificação histológica e determinaram a possibilidade de dividir os tipos de tecidos em cinco famílias: adiposo, fibroso, câncer pobremente diferenciado, câncer altamente diferenciado e tumor benigno.

Logo, apesar da radiação espalhada ser associada à degradação do contraste, o conceito de considerar o espalhamento como uma desvantagem vem mudando, devido a dois fatores importantes: 1º diversos estudos mostram o potencial do perfil de espalhamento na caracterização de tecidos mamários [22, 24–27], já que esse apresenta informação da estrutura espacial molecular que não é fornecida pela

técnica mamográfica; 2º no intervalo de energia utilizado em mamografia, 50% da radiação transmitida pela mama é devida aos fótons espalhados [28].

O perfil de espalhamento (μ_s) é também conhecido como coeficiente de espalhamento diferencial linear. É único e característico do material, sua ocorrência se deve ao efeito de interferência entre elétrons de diferentes átomos ou moléculas, e pode ser obtido experimentalmente por um sistema de difração de raios X [16,22]. A difração de raios X é descrita pela lei de Bragg: $2d\sin(\theta/2) = \lambda$, onde d corresponde ao espaçamento no plano atômico (cada material é caracterizada por um conjunto de valores de d), θ é o ângulo de espalhamento, e λ é o comprimento de onda [29]. Esta lei diz que existirá sinal de espalhamento quando houver uma interferência construtiva resultante do espalhamento de raios X proveniente de diferentes planos do material [30].

A difração de raios X é a técnica mais utilizada na investigação e caracterização de materiais, possuindo duas vertentes: difração de raios X dispersivo em ângulo (DRXDA) e difração de raios X dispersivo em energia (DRXDE) [31]. Na primeira é utilizado um feixe de raios X monoenergético e, a intensidade espalhada é medida em função do ângulo de espalhamento. Na segunda técnica a amostra é irradiada por um feixe de raios X polienergético. O detector é posicionado em um ângulo fixo em relação ao feixe incidente e o perfil de espalhamento é adquirido em função da energia do fóton espalhado [32]. A maioria dos dados de perfis de espalhamento presentes na literatura são para um sistema DRXDA [17,20,22,33–35], havendo poucos dados para um sistema DRXDE [36,37].

No entanto, o DRXDE apresenta algumas vantagens em comparação com o DRXDA. Em primeiro lugar, o uso de um tubo de raios X polienergético convencional é possível, o que facilita seu uso na clínica. Além disso, um pixel do detector pode adquirir todo o perfil de espalhamento de um determinado voxel do objeto, sendo possível adquirir os perfis de diferentes objetos em uma única medida, o que aumenta significativamente a velocidade de aquisição, ou seja, diminui o tempo de medição necessário [38]. O arranjo experimental para um sistema DRXDE não é complexo. Por outro lado, é muito difícil analisar os dados já que o número de fótons espalhados detectados inclui fatores que afetam o perfil medido [fontes espúrias (N_e), múltiplo espalhamento (MS), auto-atenuação (A), eficiência

de detector (ξ) e espectro incidente (N_0)). Estes fatores devem ser corrigidos, além disso o número de fótons espalhados detectados também é influenciado pelo borramento do sistema (resolução de momento) que deve ser reduzido para a obtenção do perfil de espalhamento. Os métodos mais usuais relatados na literatura para lidar com esses fatores podem ser divididos em analítico e simulação Monte Carlo (MC). Por outro lado, a diminuição do borramento do sistema é dada através da otimização dos parâmetros geométricos (abertura dos colimadores, distâncias, ângulo de espalhamento e espessura da amostra) e de irradiação. O último pode ser alcançado de maneira experimental, analítica ou por simulação MC. Essa otimização, dada pela correção desses fatores e redução do borramento geométrico, almeja diminuir o tempo de medida e manter uma resolução de momento suficiente para permitir a identificação dos picos característicos do μ_s [37, 39].

Nas últimas décadas o interesse em explorar novas modalidades de imagem para obter informação sobre tecido mamário vêm aumentando, como por exemplo: radiografia seletiva [40] e imagem por espalhamento [41, 42]. A última, apresenta um maior contraste entre o tecido mamário saudável e doente em comparação com a técnica mamográfica, porém ainda são escassos os estudos presentes na literatura. A maioria desses estudos disponíveis na literatura utilizam feixes monoenergéticos para a obtenção de imagens, em amostras de mama homogêneas e pequenas [43–46]. O estudo experimental de mamas com dimensões reais apresenta algumas dificuldades, como a heterogeneidade na distribuição dos tecidos em seu interior (o que limita uma investigação sistemática) e a demanda de um grande número de experimentos em diversas situações (energia, espessura, composição, etc). Assim, uma das alternativas para esse estudo é a aplicação de modelos teóricos na descrição do transporte de fótons, como por exemplo, o método MC [28]. Este método é estabelecido para simulações computacionais em radiodiagnóstico, medicina nuclear e radioterapia, permitindo descrever o transporte da radiação através de um meio material, bem como seus processos de interação.

Códigos mais conhecidos de simulação MC, como o PENELOPE [47] ou o GEANT4 [48], podem ser implementados possibilitando resultados mais precisos. O código PENELOPE (Penetration and Energy Loss of Positrons and Electrons) foi desenvolvido para simular as interações das radiações ionizantes (elétrons, pósitrons

e raios X) com a matéria usando uma base de dados moderna e realista, abrangendo uma grande faixa de energia (50 à 10^9 eV) [49]. O código PENELOPE, utilizado neste trabalho, foi modificado para considerar os efeitos de interferência envolvidos no espalhamento coerente com a finalidade de obter resultados mais próximos aos resultados reais.

Este trabalho possui dois principais objetivos:

- Estudo e análise das correções aplicadas ao número de fótons espalhados detectados por um sistema DRXDE. Otimização do sistema DRXDE, a fim de obter o perfil de espalhamento de materiais tecido-equivalentes e tecidos mamários.
- Utilização do código PENELOPE de simulação MC para obtenção de imagens planares por espalhamento de uma mama contendo um nódulo, a partir de um sistema otimizado. O objetivo é avaliar a quantidade de informação diagnóstica carregada pelos fótons espalhados, através da análise do contraste.

Esta dissertação foi organizada da seguinte forma:

O capítulo 2 faz uma breve descrição dos fundamentos teóricos em que este trabalho está alicerçado. Inicia-se com uma descrição concisa da anatomia da mama, e da produção de radiação através de um tubo de raios X. Posteriormente, são descritos os processos de interação dos raios X com a matéria, dentro da faixa de energia utilizada em radiodiagnóstico. A abordagem utilizada na descrição do espalhamento envolve o espalhamento de fótons por elétron livre e por elétron ligado.

No capítulo 3 é descrita a metodologia utilizada em cada etapa do trabalho. Inicialmente são apresentados os fatores que caracterizam um sistema DRXDE para obtenção do μ_s : i) a configuração do arranjo experimental utilizado para a medida do espectro espalhado; ii) as correções envolvidas na obtenção do μ_s ; e iii) a influência do borramento do sistema no perfil obtido. Algumas dessas correções foram estudadas por simulação MC (MS), outras por métodos analíticos (A, ξ) ou experimentalmente (N_e, N_0). Já o borramento do sistema foi obtido experimentalmente usando uma amostra de referência de quartzo (SiO_2) amorfo e analiticamente através de um algoritmo desenvolvido para o cálculo do borramento envolvido em um sistema DRXDE. Por fim, são apresentados os itens empregados na caracterização de um

sistema de imagem planar por espalhamento como ferramenta diagnóstica. Foi desenvolvido um algoritmo que reproduz o modelo geométrico simulado e calcula o contraste de primeira ordem dos fótons espalhados (C_s) entre os diferentes tecidos mamários. O C_s foi otimizado pela combinação de diferentes espectros de raios X incidentes e distâncias amostra-detector. Os parâmetros que forneceram o maior contraste foram adotados na simulação para a obtenção da imagem planar por espalhamento.

O capítulo 4 apresenta os resultados obtidos, e está dividido em duas seções. A primeira seção se refere aos resultados obtidos no estudo das correções aplicadas no espectro espalhado para a obtenção de μ_s em um sistema DRXDE, mostrando a importância de cada uma dessas correções. Também mostra a influência dos fatores geométricos no borramento do sistema. A segunda seção apresenta os resultados obtidos na formação de imagem planar por espalhamento através de simulação MC.

O capítulo 5 é dedicado as conclusões obtidas e perspectivas de trabalhos futuros que podem ser realizados baseados em nosso trabalho de modo a complementá-lo.

2 *Fundamentos Teóricos*

2.1 Anatomia da mama

A mama (figura 2.1) é constituída por tecido glandular, adiposo (gordura) e fibroso, localizada entre os lobos e lóbulos do tecido glandular juntamente com os vasos sanguíneos, vasos linfáticos e nervos.

Figura 2.1: *Representação esquemática da mama feminina [50].*

Como resumido por [8] o parênquima mamário é o componente funcional responsável pelas principais funções da mama, como secreção e produção de leite, e é composto basicamente por células epiteliais. As mamas são consideradas anexas à pele, uma vez que as glândulas cutâneas se modificaram e deram origem às glândulas mamárias ou unidades lobular. Os ductos lactíferos, ductos secretores das glândulas mamárias, dão origem de 15 a 20 lóbulos de tecido glandular que constituem a glândula e correspondem às vias de drenagem dos lóbulos, sendo esta revestida completamente pelo tecido adiposo. A maior porcentagem de câncer de mama é localizada nos ductos, onde se encontra estruturado o tecido fibroglandular

(mais sensível ao câncer induzido por radiação) [51]. A drenagem linfática da mama é extremamente importante, pois são os vasos linfáticos que conduzem células cancerígenas da mama para os linfonodos, principalmente para os da axila devido a grande parte da linfa drenar para os linfonodos axilares [51].

O estroma mamário é a componente estrutural responsável pela proteção e sustentação das estruturas da mama, sendo dividido em estroma interlobular e intralobular, sua composição é variável com o passar dos anos. Em uma mama jovem o tecido fibroglandular é predominante, enquanto que em uma mama idosa o tecido adiposo é o que predomina, já que ao se aproximar da menopausa o tecido mamário vai se atrofiando e sendo substituído progressivamente por tecido adiposo [8, 51, 52].

2.2 Produção de raios X

Os raios X foram descobertos em 1895 pelo alemão Wilhelm Conrad Rontgen, fato que lhe rendeu o prêmio Nobel de Física em 1901. Este tipo de radiação possui a capacidade de penetrar o interior de materiais sendo amplamente utilizados na medicina em exames radiográficos. Podem ser gerados através de um tubo de raios X como ilustra a figura 2.2 [53–55].

Figura 2.2: *Tubo de raios X simplificado [56].*

Em um tubo de raios X a medida que os elétrons são liberados pelo cátodo, por efeito termoiônico, caminham em direção ao ânodo (alvo). Eles são acelerados no vácuo pela tensão entre os eletrodos (cátodo e ânodo). Em radiodiagnóstico essa

tensão varia de 20 a 150 kV. No impacto com o alvo, a energia cinética dos elétrons é convertida em outras formas de energia, como por exemplo raios X e calor (forma de energia predominante) [53,56]. Materiais com elevado número atômico (Z) são mais eficientes na produção de raios X. Este é um dos motivos para alvos de tungstênio W , ($Z=74$), serem frequentemente utilizados, além de possuírem elevado ponto de fusão [55].

O espectro de raios X produzido (figura 2.3) possui duas componentes distintas: radiação Bremsstrahlung e radiação característica [57].

Figura 2.3: Exemplo de um espectro de raios X filtrado proveniente de um alvo de W com kV_p de 90 kV [53].

2.2.1 Radiação Bremsstrahlung

A parte contínua do espectro de raios X é denominada radiação Bremsstrahlung (figura 2.4).

Quando elétrons acelerados passam próximo ao núcleo atômico, sendo atraídos pelo campo elétrico positivo deste, conseqüentemente são desacelerados pelas forças Coulombianas, mudando assim suas direções e ocasionando uma perda de energia cinética que é emitida na forma de fóton de raios X denominada radiação Bremsstrahlung. Este tipo de radiação é responsável pela maior parte da emissão de raios X. Sua energia é determinada pela distância entre o elétron incidente e o núcleo alvo, uma vez que a força coulombiana é proporcional ao inverso do quadrado da distância [58].

Figura 2.4: Ilustração dos processos de interação dos elétrons com o núcleo atômico do alvo. A energia do raios X produzido depende da distância de interação entre o elétron e o núcleo do alvo [53].

2.2.2 Radiação Característica

Os picos discretos de energia de raios X são denominados “radiação característica”, a qual é ilustrada pela figura 2.5.

Figura 2.5: Aproximação esquemática do modelo de Bohr para a produção de radiação característica em um átomo do alvo. Onde o elétron (1) colide com um elétron ligado da camada k , ejetando-o (2). Um elétron da camada L preenche a vacância deixada na camada K (3), e a diferença de energia dessas camadas resulta na emissão de radiação característica (4). Sequência numérica para ocorrer a emissão de radiação característica 1, 2, 3 e 4 [53].

A energia deste tipo de radiação depende da composição elementar do alvo. Sabe-se que os elétrons em um átomo são distribuídos em camadas eletrônicas ou níveis de energia, cada qual tem uma energia de ligação que é “característica” do elemento químico alvo. Quando um elétron colide com outro elétron ligado, com energia cinética suficiente para arrancá-lo do átomo criando assim uma vacância que pode ser preenchida por um elétron de uma camada mais externa, resultando na emissão de radiação “característica” com energia dada pela diferença de energia entre as duas camadas envolvidas no processo, ou na liberação de um elétron Auger, nomenclatura dada ao elétron que recebeu a energia liberada nessa transição eletrônica [53].

2.3 Interação da Radiação com a Matéria

As interações dos raios X com a matéria dependem basicamente da energia dos fótons incidentes e do material alvo (Z). Quando um fóton, na faixa de energia utilizada em radiodiagnóstico, interage com a matéria, pode passar pelo processo de absorção, como no caso do efeito fotoelétrico, ou espalhamento, como nos casos do espalhamento elástico e inelástico. Cada um desses processos são descritos nas subseções a seguir.

2.3.1 Efeito fotoelétrico

No efeito fotoelétrico, representado pela figura 2.6, toda a energia do fóton incidente é transferida para um elétron que é ejetado do átomo (fotoelétron) quando a energia do fóton é maior que a energia de ligação. Parte dessa energia é usada para vencer a energia de ligação e a remanescente é dada para o fotoelétron em forma de energia cinética [59]. Após o fotoelétron ser ejetado é originada uma vacância em um orbital eletrônico do átomo que pode ser preenchida por um elétron de uma camada mais externa, resultando na emissão de raios X característicos ou de elétrons Auger [60, 61].

Figura 2.6: Representação esquemática do efeito fotoelétrico [59].

2.3.2 Espalhamento elástico

Quando a onda eletromagnética (EM) interage com a matéria e é desviada da sua trajetória inicial de modo que não sofra variação na sua energia, temos o chamado espalhamento elástico que também é conhecido como espalhamento coerente. O campo elétrico da onda EM, com comprimento de onda λ , associado a esse fóton dá origem a uma vibração dos elétrons presentes na matéria. Devido a essa aceleração estes elétrons emitem uma radiação de mesmo comprimento de onda λ que a radiação incidente [3]. O elétron envolvido no processo pode ser considerado livre ou ligado ao átomo, essas duas abordagens são mostradas a seguir.

2.3.2.1 Espalhamento elástico por elétron livre

Quando o espalhamento elástico ocorre com um elétron livre denomina-se espalhamento Thomson, em homenagem ao primeiro cientista que obteve, através da interpretação clássica, a seção de choque diferencial $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)$ por elétron [3].

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Th} = \frac{r_0^2}{2}(1 + \cos^2\theta) \quad (2.1)$$

onde $r_0 = 2.81794 \times 10^{-15}m$ é o raio clássico do elétron e θ é o ângulo de espalhamento.

2.3.2.2 Espalhamento elástico por elétron ligado

O espalhamento elástico por elétron ligado é também conhecido como espalhamento Rayleigh, devido ao físico John W. Rayleigh em 1900 ter desenvolvido

a teoria clássica para o espalhamento da radiação eletromagnética por átomo [57]. Este processo é ilustrado pela figura 2.7.

Figura 2.7: *Espalhamento Rayleigh [59].*

Esse processo ocorre quando a onda EM interage com o átomo do alvo e os elétrons deste átomo começam a oscilar em fase devido à influência do campo elétrico da onda EM incidente. Estes elétrons emitem radiação no mesmo comprimento de onda λ da radiação EM incidente. Essas ondas se combinam originando uma onda espalhada com energia frequência iguais à da onda EM incidente.

O ângulo de espalhamento é relativamente pequeno devido a energia de recuo do átomo ser muito pequena e não produzir nenhuma excitação ou ionização atômica [57]. Este tipo de interação ocorre com maior frequência em baixas energias e em materiais alvos com alto número atômico, podendo sua seção de choque diferencial ser escrita por [3]

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{coe} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Th} F^2(q) \quad (2.2)$$

onde o termo $F(q)$ é o fator de forma atômico que é fornecido pela transformada de Fourier da densidade eletrônica, e q é a magnitude do momento transferido para um fóton de energia E e ângulo de espalhamento θ , o qual é dado por $\hbar q = (2E/c) \sin(\theta/2)$ em unidades de mc .

O fator $F(q)$ é, na prática, expresso como função de χ ao invés de q , os quais relacionam-se por [22]

$$\chi = 20.607744 \hbar q = \frac{E \sin(\theta/2)}{1.2398} \quad (2.3)$$

onde χ está em unidade de nm^{-1} , E está em keV e θ em graus.

O fator de forma para uma molécula é representado por $F_m(\chi)$ e pode ser obtido de três formas:

- A primeira aproximação é denominada de modelo atômico independente (MAI), a qual considera que cada átomo do material contribui de forma independente para o espalhamento, ou seja, considera apenas a correlação entre elétrons de um mesmo átomo [20]. No caso de materiais compostos esta aproximação equivale a regra das misturas. Logo, o fator de forma molecular resulta da combinação dos fatores de forma dos átomos que constituem o material e é expresso por

$$F_m^2(\chi) = \sum n_i F^2(\chi, Z_i) \quad (2.4)$$

onde n_i é a abundância atômica do elemento i , Z é o número atômico do elemento i e $F(\chi, Z_i)$ é o fator de forma atômico do elemento i . A abundância atômica é dada por $n_i = \frac{w_i A_i}{M}$ onde w_i é a fração de peso do elemento i , A_i é a massa atômica do elemento i , e M é a massa da molécula.

Esta abordagem é normalmente utilizada em códigos Monte Carlo, como por exemplo no código PENELOPE [28].

- A segunda aproximação também calcula $F_m(\chi)$, porém é considerado no cálculo a correlação entre diferentes átomos de uma mesma molécula.
- A terceira aproximação é dada pela correlação entre diferentes átomos ou moléculas. Nesta aproximação, no cálculo do fator de forma, é considerado a organização espacial das moléculas presentes no material. Assim o fator de forma carrega informação não só dá estrutura molecular como também da estrutura do material, sendo denominado fator de forma equivalente $F_{eq}(\chi)$. Para tal fim, em baixos momentos transferidos ($\chi < 5 \text{ nm}^{-1}$) o efeito de interferência entre elétrons de diferentes átomos ou moléculas deve ser considerado [20]. O efeito de interferência origina uma distribuição do número de fótons espalhados elasticamente em função do ângulo de espalhamento ou

do momento transferido, denominada perfil de espalhamento, que caracteriza o material [22].

Para um material mono-molecular, $F_{eq}(\chi)$ é expresso por [62, 63]

$$F_{eq}(\chi) = F_m(\chi) \times \sqrt{I(\chi)} \quad (2.5)$$

onde $F_m(\chi)$ é o fator de forma molecular que pode ser obtido por qualquer uma das aproximações citadas anteriormente, e $I(\chi)$ é a função de interferência.

$F_{eq}(\chi)$ é obtido geralmente de modo empírico, já que os cálculos teóricos para sua obtenção são complexos [22].

A aproximação fornecida pelo MAI não é válida para espalhamento de raios X em baixos momentos transferidos devido a ocorrência de efeitos de interferência nessa faixa de momento. A Figura 2.8 compara o fator de forma para o acrílico (PMMA) tabelado originalmente pelo PENELOPE (MAI) com o apresentado por Poletti et al [22], o qual foi obtido experimentalmente considerando assim o efeito de interferência.

Nota-se que a aproximação do MAI falha no intervalo de $0 < \chi < 5 \text{ nm}^{-1}$ onde os efeitos de interferência molecular mostram suas principais contribuições. Porém, a partir de $\chi = 5 \text{ nm}^{-1}$ o MAI converge com os dados experimentais. O mesmo comportamento é apresentado por outros materiais, como mencionado pela literatura [64].

2.3.3 Espalhamento inelástico

O espalhamento inelástico ou incoerente, representado pela figura 2.9, é caracterizado pela interação de um fóton com um elétron de uma camada mais externa do átomo, esse elétron é ejetado e a radiação é espalhada com energia menor e em direção diferente da incidente. O espalhamento incoerente foi tratado inicialmente por Compton que considerou a radiação incidente como pacotes de onda quantizados com energia $h\nu$, por isso esse processo também recebe o nome de espalhamento Compton [3].

O espalhamento inelástico pode ser descrito considerando o espalhamento por elétron livre ou por elétron ligado.

Figura 2.8: Fatores de forma para o PMMA em função do momento transferido calculado pelo PENELOPE (MAI), linha sólida, obtido experimentalmente por Poletti et al [22], linha tracejada, e o construído neste trabalho, linha pontilhada.

Figura 2.9: Representação esquemática do espalhamento Compton [59].

2.3.3.1 Espalhamento inelástico por elétron livre

Nesta abordagem assume-se que o espalhamento inelástico ocorre essencialmente com elétrons “livres” e estacionários. O termo livre significa que a energia de ligação do elétron é muito menor que a energia com que o fóton interage [61]. A seção

de choque diferencial $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)$ de espalhamento inelástico por elétron livre (chamada Klein-Nishina) considerando um feixe não-polarizado e um elétron em repouso é dado por [3]

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{KN} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Th} F_{KN} \quad (2.6)$$

onde F_{KN} é o fator Klein-Nishina que é menor ou igual a 1, e é dado por

$$F_{KN} = \left[\frac{1}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)} \right]^2 \left[1 + \frac{\alpha^2(1 - \cos \theta)^2}{[1 + \alpha(1 - \cos \theta)](1 + \cos^2 \theta)} \right] \quad (2.7)$$

onde $\alpha = \frac{h\nu}{m_0c^2}$.

2.3.3.2 Espalhamento inelástico por elétron ligado

A seção de choque para este caso é representada como produto da seção de choque de Klein-Nishina para elétron livre (equação 2.6) com a função de espalhamento incoerente $S(\chi, Z)$. Este último fornece a probabilidade de um elétron que recebeu um momento (q), deixar o átomo [3]. A seção de choque diferencial para o caso do espalhamento inelástico por elétron ligado é dada por

$$\frac{d\sigma_{inc}}{d\Omega} = \frac{d\sigma}{d\Omega} \times S(\chi, Z) \quad (2.8)$$

2.4 Coeficiente de atenuação linear

O coeficiente de atenuação linear total (μ) representa a probabilidade de interação por unidade de caminho e é dada por [65]

$$\mu = \sigma \times n_V \quad (2.9)$$

onde σ é a seção de choque total que é dada pela soma das contribuições individuais da seção de choque dos processos de interação da radiação com a matéria, enquanto n_V é o número de átomos por unidade de volume e é expresso por $n_V = \frac{N_a \rho}{A}$ em que $N_a = 6,022 \times 10^{23}$ é o número de Avogadro, ρ é a densidade e A é a massa atômica.

Dada uma mistura de composição química conhecida é possível obter o seu coeficiente de atenuação (μ_{mis}) através da regra das misturas, a qual resulta da combinação dos coeficientes de atenuação lineares dos átomos que constituem o material, logo

$$\mu_{mis} = \sum_i w_i \rho_{mis} \left(\frac{\mu}{\rho} \right)_i \quad (2.10)$$

onde w_i é a fração de peso, $\left(\frac{\mu}{\rho} \right)_i$ é o coeficiente de atenuação linear mássico, ambos para o i -ésimo elemento constituinte da mistura, e ρ_{mis} é a densidade da mistura.

3 *Materiais e Métodos*

3.1 Caracterização de um SDRXDE

A determinação do perfil de espalhamento por meio de um SDRXDE é realizada em um arranjo experimental fixo, no qual é necessária uma boa colimação a fim de limitar a faixa angular em que os fótons podem atingir o detector. Este sistema de colimação reduz a taxa de contagem de fótons espalhados detectados, consequentemente o tempo de aquisição requerido aumenta. A otimização de um SDRXDE é de extrema importância para reduzir essa faixa de aceitação angular e simultaneamente obter uma boa taxa de contagem [30]. Um sistema ideal é aquele que resolve bem os picos de espalhamento com uma boa estatística de contagem.

Esta seção corresponde à caracterização do SDRXDE, a qual consiste na descrição do arranjo experimental, nas correções envolvidas para a obtenção do perfil de espalhamento e, por fim, na resolução intrínseca do sistema.

3.1.1 Arranjo experimental para um SDRXDE

O esquema do arranjo experimental utilizado no Laboratório de Física das Radiações e Dosimetria, do Departamento de Física da Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto (DF-FFCLRP, USP) é mostrado na figura 3.1. Foi utilizado um tubo de raios X (Philips PW 2215/20) com ânodo de W, foco ponto, filtração intrínseca de 0,3mm de berílio (Be) e filtração adicional de 0,315 mm Al e 0,052 mm Cu, operado em 60 kVp e 10 mA. A distância da fonte do tubo de raios X à amostra foi de 39,95 cm. A distância da amostra ao detector variou de 9,75 cm a 14,75 cm. Um porta-amostra de PMMA de 8 mm de diâmetro foi utilizado para posicionar a amostra no centro do goniômetro formando um ângulo de 90° em relação ao feixe incidente. Três sistemas de colimação foram empregados no arranjo, composto por: um colimador cilíndrico (1 mm de diâmetro (ϕ)) posicionado na saída do tubo de raios X e outros dois (variaram de $\phi=1$ a 2 mm) acoplados ao detector.

Foi utilizado um detector de silício (SDD) da Amptek (modelo X-123) de 25 mm^2 de área, $450\text{ }\mu\text{m}$ de espessura e janela de Be ($12,5\text{ }\mu\text{m}$), com resolução em energia por exemplo em 30 keV de 270 eV . O detector foi posicionado com θ variando de 6° a 12° em relação ao feixe incidente. O sistema de detecção X-123 SDD combina em um único dispositivo o detector SDD, o pré-amplificador (XR-100SDD), o processador digital de pulsos (DP5), o multicanal, a fonte de alta tensão (PC5) e a interface com o computador. O sinal fornecido por este sistema é dado pela contagem em função do número de canais. Para converter o número de canais em energia é necessário realizar a calibração do sistema de detecção. Essa calibração foi determinada a partir da correlação entre energia de emissão das fontes radioativas e o número do canal correspondente a cada energia. Foram utilizadas as fontes de Fe^{55} e Am^{241} (picos em $5,89\text{ keV}$ e $59,54\text{ keV}$, respectivamente).

Figura 3.1: Representação esquemática do arranjo experimental empregado nas medidas de distribuição de energia dos fótons espalhados [64].

Os materiais estudados foram: acrílico ($C_5H_8O_2$), nylon ($C_6H_{11}NO$), polietileno (C_2H_4) e teflon (C_2F_4). Variou-se a espessura da amostra em 2, 5, 12, 20 e 32 mm. Para obter uma boa estatística de contagem, as medidas foram realizadas em um intervalo de tempo de 3600 s.

3.1.2 Obtenção do perfil de espalhamento (μ_s)

Há várias etapas envolvidas na obtenção do μ_s . A primeira é retirar a contribuição de fontes espúrias na distribuição de energia do número de fótons espalhados detectados (N^D). Esta distribuição é um somatório do número de fótons provenientes da amostra a ser investigada e de diversas fontes espúrias (radiação ambiente, espalhamento no porta-amostras e espalhamento nos colimadores). Foi medido o espalhamento proveniente de fontes espúrias através do sistema representado pela figura 3.1. A medida foi realizada na ausência da amostra e em um intervalo de tempo de 12 horas. A máxima contribuição por canal proveniente de fontes espúrias obtida foi menor que 1% em relação a N^D , portanto esta correção foi desprezada.

A distribuição em energia do número de fótons espalhados detectados provenientes da amostra é constituída por espalhamento simples e múltiplo. O espalhamento simples (espalhamento único) carrega informação da posição referente à um único centro espalhador. O espalhamento múltiplo (mais de um espalhamento) acumula informações de vários centros espalhadores onde ocorreram o múltiplo espalhamento, carregando uma informação não útil para o perfil de espalhamento.

A segunda etapa consiste na subtração da contribuição proveniente de espalhamento múltiplo, resultando no número de fótons que sofreram espalhamento simples na amostra. Essa contribuição pode ser obtida analiticamente, determinada apenas para processos de espalhamento duplo e geometrias restritas [66], e através da simulação MC (método computacional mais utilizado) [39,67]. Neste trabalho, a contribuição proveniente de espalhamento múltiplo foi obtida através de simulação MC.

Na faixa de energia de 60kVp e θ de 6° a 12°, faixa angular utilizada neste trabalho para o SDRXDE, a energia transferida para o elétron no espalhamento Compton é irrelevante. Desta forma, foi assumido que a energia do fóton antes e após o espalhamento é a mesma.

O número de fótons detectados, em um dado ângulo com uma determinada energia, que sofreram espalhamento simples na amostra ($N_{(E,\theta)}^{D_{corr}}$) se relaciona com

μ_s pela equação [28]

$$N_{(E,\theta)}^{D_{corr}} = \int_{amostra} N_0(E) \mu_s(E, \theta) e^{-\mu(E,Z)l} e^{-\mu(E,Z)D} \xi(E) dV \int_{detector} d\Omega \quad (3.1)$$

onde $N_0(E)$ é o espectro incidente, $\mu(E, Z)$ é o coeficiente de atenuação linear da amostra, $e^{-\mu l}$ é a atenuação durante o caminho l percorrido da superfície ao ponto de espalhamento da amostra, $e^{-\mu D}$ é a atenuação durante o caminho D percorrido pelo fóton desde o ponto de espalhamento até a superfície da amostra, $\xi(E)$ é a eficiência do detector, dV é o elemento de volume na amostra, e $d\Omega$ é a diferencial de ângulo sólido visto pelo detector (considerando os colimadores). A eficiência do detector foi considerada a mesma para o espalhamento elástico e inelástico, já que o fóton não muda de energia ao espalhar.

As componentes presentes em $N_{(E,\theta)}^{D_{corr}}$ podem ser fatorizadas individualmente, sendo reescritas como

$$N^{D_{corr}}(E, \theta) = \mu_s(\chi) A(t, E) \xi(E) N_0(E) t \quad (3.2)$$

onde $A(t, E)$ é o fator de auto-atenuação e t é a espessura da amostra. Desta maneira o $\mu_s(\chi)$ pode ser obtido por

$$\mu_s(\chi) = \frac{N^{D_{corr}}(E, \theta)}{A(t, E) \xi(E) N_0(E) t} \quad (3.3)$$

Uma vez que o ângulo de espalhamento é fixo, os fatores da equação 3.3 são unicamente dependentes da energia do fóton. Logo, a terceira etapa consiste na correção de $N_{(E,\theta)}^{D_{corr}}$ pela auto-atenuação, eficiência do detector e espectro incidente [35]. As subseções a seguir descrevem como cada uma das etapas constituintes das correções efetuadas para a obtenção do $\mu_s(\chi)$ foram obtidas.

3.1.2.1 Fatores de correção

A. Multiplo-espalhamento

Através de simulação MC foram avaliadas as contribuições proveniente de espalhamento simples e múltiplo, como também o tipo de espalhamento envolvido

neste processo. Com o intuito de simular o espalhamento elástico de raios X com maior veracidade, foi necessário modificar o fator de forma utilizado pelo PENELOPE a fim de considerar os efeitos de interferência descritos na subsubseção 2.3.2.2. Uma vez que a seção de choque do espalhamento elástica para um dado material é calculada no código PENELOPE e em muitos outros códigos MC através da aproximação do MAI.

O fator de forma experimental implementado ($F_{eq}(\chi)$) foi retirado da literatura de Poletti et al. [22]. A modificação do fator de forma foi realizada no arquivo .mat do PENELOPE, sendo embasada no artigo de Rios et al. [68]. A validação dessa modificação foi feita através da comparação do espectro espalhado medido com o simulado, como mostra a figura 3.2.

Figura 3.2: Espectros espalhados obtidos, neste trabalho, experimentalmente e por simulação MC, para uma amostra de PMMA com $t=12$ mm, $\theta=6^\circ$, $\phi=2$ mm e distância amostra-detector de 9,75 cm.

Como pode ser observado na figura 3.2 o espectro espalhado experimental foi reproduzido corretamente pela simulação após a implementação da função de interferência (equação 2.3.2.2), apresentando assim uma boa concordância entre ambas, a diferença média relativa foi menor que 3%.

B. Auto-atenuação

A auto-atenuação (A) representa a atenuação sofrida pelo feixe incidente e espalhado ao passar pela amostra como ilustra a figura 3.3. Os valores de A foram obtidos por métodos analíticos e numéricos a fim de observar as dependências apresentadas por cada um dos métodos, bem como analisar suas diferenças.

Figura 3.3: Representação esquemática do efeito de auto-atenuação [9].

No método analítico foi considerado um feixe estreito paralelo incidindo perpendicularmente à amostra em uma geometria de transmissão. A influência de A no número de fótons detectados é dada pela integral de caminho:

$$A \equiv \frac{1}{\int_0^t dt} \int_0^t e^{-(\mu l + \mu D)} dl = \frac{e^{\mu t} - e^{(-\mu t / \cos \theta)}}{\mu t (-1 + 1 / \cos \theta)} \quad (3.4)$$

onde $D = \frac{l_1}{\cos \theta} = \frac{t - l}{\cos \theta}$.

Para o cálculo de A , através do método numérico, foi criado um algoritmo bidimensional, onde o feixe incidente foi considerado tanto paralelo como divergente a fim de comparar os resultados obtidos para ambos os casos. Para isso, a amostra foi dividida em n elementos de área, ou seja, n pontos de espalhamento. Para cada um desses n elementos foi calculado o A_n (auto-atenuação para cada ponto de espalhamento), dada pela multiplicação da atenuação sofrida pelo feixe antes e depois do ponto de espalhamento. Logo, foi obtida uma distribuição de A_n em

função do ponto de espalhamento para cada energia presente no espectro incidente. Por fim, foi calculado um A médio para cada uma dessas energias.

C. Eficiência do detector

O espectro medido através do arranjo experimental ilustrado pela figura 3.1 foi corrigido pela eficiência do detector (figura 3.4). A eficiência foi calculada analiticamente por $\xi(E) = e^{-\mu_{Be}t_{Be}}(1 - e^{-\mu_{Si}t_{Si}})$, onde μ_{Be} e μ_{Si} são os coeficientes de atenuação linear para o Berílio e o Silício, t_{Be} e t_{Si} são as espessuras para a janela de Berílio e o detector de Silício, respectivamente. Ambos os coeficientes de atenuação foram retirados da base de dados fornecida pelo NIST [69].

Figura 3.4: Eficiência calculada em função da energia do detector Silicon Drift (Amptek X-123, SDD).

A figura 3.4 mostra que o detector SDD utilizado apresenta maior eficiência para fótons na faixa de energia entre 5 e 18 keV.

D. Espectro incidente

O arranjo experimental para a determinação da distribuição espectral do feixe incidente, figura 3.5, utiliza uma geometria de feixe estreito (bem colimado).

Para isso, são utilizados colimadores e uma grande distância entre o tubo de raios X e o detector.

Figura 3.5: Arranjo experimental utilizado para medição do espectro incidente [70].

O sistema de colimação é composto por um colimador cilíndrico ($\phi=1$ mm) posicionado na saída do tubo de raios X, utilizado para reduzir o tamanho do feixe, e mais dois colimadores ($\phi=2$ mm) posicionados ao longo da trajetória do feixe. Além disso, há mais dois colimadores de chumbo ($\phi=2$ mm) acoplados ao detector, a fim de evitar sua saturação devido à elevada quantidade de fótons que atingem o seu volume sensível.

O espectro incidente foi obtido experimentalmente através da medição do feixe de fótons incidindo diretamente sobre o detector. Como meio de validação foram também medidas as camadas semi-redutoras (primeira e segunda CSR) para o tubo de raios X operando a 60 kVp e 10 mA, com filtração adicional de 0,315 mmAl e 0,052 mmCu. As medidas de CSR foram feitas com a câmara PTW TN34069-2.5, distância foco-detector de 80cm.

3.1.2.2 Borramento intrínseco

O borramento intrínseco do sistema, também denominado resolução de momento ($\Delta\chi$), é mais um fator importante que deve ser considerado na hora da construção e otimização de um SDRXDE. Em um SDRXDE a fonte de radiação é polienergética e há um intervalo de ângulos próximos de θ no qual os fótons espalhados podem ser detectados, ocasionando um borramento no espectro espalhado detectado. Isso alarga o espectro dificultando a definição dos picos uma vez que χ depende da anergia e do ângulo de espalhamento.

A. Métodos utilizados para determinação do borramento

Um algoritmo foi construído para obtenção do borramento geométrico intrínseco do sistema, o qual foi validado através da comparação com as medidas de borramento obtidas experimentalmente.

A.1 Experimental

Uma amostra padrão de quartzo amorfo com $t=2,79$ mm foi irradiada nas mesmas condições e pelo mesmo arranjo descrito pela subseção 3.1.1. O borramento foi avaliado variando os seguintes parâmetros geométricos: ângulo de espalhamento (6° , 9° e 12°), distância amostra-detector (9,75 cm e 14,75 cm) e diâmetro dos colimadores (1 mm e 2 mm).

O borramento do sistema pode ser obtido através de dados experimentais, sendo expresso pela resolução relativa em energia do sistema $\left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{exp}$, segundo [71]

$$\left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{exp} = \frac{FWHM}{E_0} \quad (3.5)$$

onde FWHM é a largura da distribuição em energia à um nível que é apenas metade da intensidade máxima e E_0 é a localização do centróide dessa distribuição.

Assim, $\left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{exp}$ é adimensional e, geralmente, expresso em porcentagem, podendo ser convertido em resolução de momento relativa através da equação 2.3. Este fator considera as influências dos parâmetros geométricos e da resolução em energia do detector no borramento do sistema. Uma vez que, experimentalmente, não é possível separar a parcela do borramento que é devido aos parâmetros geométricos e a parcela que provém do detector utilizado na medida.

A.2 Numérico

Para o caso de cristais, os picos originados do espalhamento elástico provindos de diferentes planos atômicos seguem a condição de Bragg (equação 3.6).

$$d = \frac{6,199}{E \sin(\theta/2)} = \frac{1}{2\chi} \quad (3.6)$$

onde d é o espaçamento interplanar dado em angstrom ($\text{\AA}$), E é a energia dada em keV e θ é o ângulo de espalhamento dado em graus.

Como a energia do pico de espalhamento depende de θ , consequentemente a largura a meia altura do pico de espalhamento depende da resolução angular do sistema ($\Delta\theta_{geo}$) e da resolução em energia do detector (ΔE_{det}), como ilustra a figura 3.6.

Figura 3.6: Esquema das faixas de ângulo e energia aceitas pelo detector [72].

A resolução de momento do sistema pode ser estimada a partir de $\Delta\theta_{geo}$ e ΔE_{det} , segundo [39]

$$\Delta\chi = \frac{\sqrt{[(E/2) \cos(\theta/2) \Delta\theta_{geo}]^2 + [\sin(\theta/2) \Delta E_{det}]^2}}{12,398} \quad (3.7)$$

A resolução de momento relativo é dada por

$$\frac{\Delta\chi}{\chi} = \sqrt{\left(\frac{\Delta E_{det}}{E}\right)^2 + \left(\frac{\cot(\theta/2) \Delta\theta_{geo}}{2}\right)^2} \quad (3.8)$$

A resolução angular do sistema pode ser convertida em energia através da equação 2.3. Assim as equações 3.7 e 3.8 poderiam ser expressas apenas em função da energia. Em qualquer geometria a faixa de ângulos aceita é uma proporção fixa em relação a θ . Dessa forma, quando a faixa angular é convertida em energia, a distribuição do borramento em energia é uma proporção fixa em relação a E , e consequentemente quanto maior o E maior será o borramento [72].

A.2.1 Resolução angular geométrica

$\Delta\theta_{geo}$ é uma combinação dos parâmetros geométricos do sistema e da espessura da amostra. Pode ser representado pela aproximação dada pelo

histograma dos ângulos de espalhamento obtidos por todos os pontos da área espalhada efetiva. Esta área é determinada pela intersecção do feixe primário colimado com a aceitação angular que é definida pelos colimadores do detector.

O histograma da aceitação angular foi obtido através de um algoritmo desenvolvido em MATLAB. Neste algoritmo, o feixe foi considerado paralelo, a área espalhadora foi dividida em elementos infinitesimais de áreas menores (0,1 mm x 0,1 mm). Para cada elemento de área, foi calculado o ângulo máximo e mínimo detectado, isso se repetiu até varrer toda a amostra. Por fim, após varrer toda a amostra foi construído um histograma a partir dos ângulos máximo e mínimo, ou seja, foi obtida uma distribuição. Essa distribuição fornecida em ângulo foi convertida em uma distribuição em energia. A resolução em energia devido a geometria ΔE_{geo} é dada pela diferença entre as energias correspondentes a FWHM da distribuição.

A.2.2 Resolução em energia do detector

ΔE_{det} é dependente do detector SDD da Amptek X-123 e da eletrônica de conformação do pulso. Assim foi utilizada a resolução fornecida pelo manual apresentado pelo fabricante, porém foram necessários alguns ajustes: extrapolação da energia e correção pelo tempo de pico [73]. A resolução em energia do detector é dada pela figura 3.7.

Figura 3.7: Resolução em energia do detector SDD da Amptek X-123 [73].

3.1.2.3 Otimização do borramento de um SDRXDE

A otimização depende das condições geométricas envolvidas no aparato experimental, da resolução em energia do detector e do borramento aceito. O algoritmo desenvolvido pode fornecer, de acordo com os dados de entrada que são: largura do feixe incidente, espectro incidente, espessura da amostra, número de elementos em que a amostra será dividida, abertura dos colimadores, distância amostra-detector e ângulo de espalhamento, o borramento intrínseco associado ao sistema.

3.2 Caracterização de um sistema de imagem por espalhamento

Nesta seção são apresentados os métodos, empregados na caracterização de um sistema de imagem por espalhamento como ferramenta diagnóstica. A subseção 3.2.1 apresenta o algoritmo desenvolvido para a obtenção da distribuição radial da intensidade espalhada de primeira ordem e do contraste associado a esta distribuição. Também são apresentados os parâmetros a serem avaliados para a otimização do contraste. A subseção 3.2.2 descreve o arranjo utilizado para a obtenção de imagens planares por espalhamento de tecido mamário através de simulação MC. Por fim, a subseção 3.2.3 fornece a obtenção da imagem por espalhamento a partir de um sistema de imagem otimizado.

3.2.1 Quantificação analítica da intensidade espalhada de 1º ordem

A. Algoritmo

O algoritmo é baseado em cálculos computacionais analíticos, o qual possui laços que dependem de alguns parâmetros: energia do fóton incidente (no caso de um espectro polienergético); número de elementos de área no qual a área irradiada é dividida; e número de pixels compreendidos em um detector plano ideal (eficiência desprezada). Logo, os cálculos envolvidos na quantificação da intensidade espalhada, de primeira ordem, são realizados para cada energia presente no espectro polienergético para cada elemento de área (pixel) do detector (figura 3.8).

Figura 3.8: Modelo geométrico empregado na detecção da intensidade espalhada de primeira ordem. f é a largura do feixe incidente, t é a espessura da amostra, H é a distância entre amostra-detector, θ_{min} e θ_{max} são os ângulos mínimo e máximo formados entre o feixe incidente e espalhado, e $\bar{\theta}$ é o ângulo médio que é formado entre o feixe incidente e o feixe espalhado.

A intersecção da largura do feixe incidente f com a espessura t da amostra define a área da amostra que é irradiada, a qual é dividida em N elementos de área, ao longo da largura do feixe incidente e da espessura da amostra. A distribuição em energia espalhada por um elemento de área da amostra ($da_{i,j,k}$) que atinge um pixel do detector ($dA_{pix_{i,j,k}}$) é dado por

$$d\epsilon_{s_{i,j,k}}(r) = A'_{i,j,k} \times N_{i,j} \times \bar{\mu}_s(\bar{\theta}_{i,j,k}) \times E \times p(E) \times \Delta\Omega_{i,j,k} \times dA_{pix_{i,j,k}} \quad (3.9)$$

onde $A'_{i,j,k}$ é a auto-atenuação, $N_{i,j}$ é o número de fótons incidentes na partição i, j da amostra, $\bar{\mu}_s(\bar{\theta}_{i,j,k})$ é o perfil de espalhamento total médio, E é a energia do fóton incidente, $p(E)$ é a probabilidade do fóton possuir a energia E , $\Delta\Omega_{i,j,k}$ é o ângulo sólido visto pelo pixel do detector, e $dA_{pix_{i,j,k}}$ é a diferencial de área do pixel. Alguns desses fatores são descritos a seguir.

1º A auto-atenuação ($A'_{i,j,k}$) sofrida pelo número de fótons incidentes no elemento de área do pixel $dA_{pix_{i,j,k}}$ devido a partição i, j da amostra foi calculada através do algoritmo previamente apresentado pela seção 3.1.2.1. Este algoritmo foi modificado para calcular $A'_{i,j,k}$ em cada pixel k do detector.

2º Cálculo do número de fótons que espalharam na direção entre θ_{min} e θ_{max}

a partir do perfil de espalhamento médio, como ilustra a figura 3.9. Foi utilizado o μ_s para os tecidos mamários glandular, adiposo, carcinoma e mistura (50% glandular - 50% adiposo), fornecidos pela literatura [20, 22, 33, 74].

Figura 3.9: Ilustração da seleção da área do perfil de espalhamento compreendida entre θ_{min} e θ_{max} , os quais são definidos pelo extremo do pixel e pela energia do fóton.

3º Cálculo do ângulo sólido ($\Delta\Omega_{i,j,k}$) formado entre o ponto de espalhamento (i, j) e a área do pixel $dA_{pix_{i,j,k}}$.

$$\Delta\Omega_{i,j,k} = \frac{\cos^3(\bar{\theta}_{i,j,k})}{d_{i,j,k}^2} \quad (3.10)$$

onde $d_{i,j,k}$ é a distância do centro da partição x, y da amostra até o detector na posição k .

Logo, cada pixel possui uma distribuição em energia espalhada diferente (figura 3.10). A somatória dessas distribuições fornece a distribuição radial de energia espalhada sobre o detector $\varepsilon_s(r)$.

B. Validação

A distribuição radial de energia espalhada obtida pelo algoritmo foi comparado com o obtido pela simulação MC (previamente validado, como descrito pela subsubseção 3.2.2). Para tal, foram simulados o modelo geométrico e as condições adotadas pela literatura de referência [75]. O modelo consistiu em um fantoma composto por H_2O de 10 cm de espessura, a uma distância amostra-detector de 4 cm em relação ao centro da amostra, e um feixe incidente monoenergético de 60

Figura 3.10: Exemplo das distribuições em energia de cada pixel. Os Pix1, Pix2 e Pix3 se referem ao pixels do extremo superior, do meio e do extremo inferior (próximo ao feixe incidente), respectivamente, como ilustrados pela figura 3.8.

keV. O fator de forma da água implementado foi obtido de Morin et al. [74]. A figura 3.11 mostra a distribuição radial de energia espalhada sobre o detector (intensidade espalhada) obtido por simulação MC e o calculado pelo algoritmo desenvolvido neste trabalho, ambos foram normalizados pela intensidade máxima.

Figura 3.11: Distribuição radial de energia espalhada sobre o detector normalizada pela intensidade máxima (ε'_s). Para um feixe de 60 keV incidindo em uma amostra de água de 10 cm de espessura, distância amostra-detector 4 cm e 10^6 histórias.

A figura 3.11 mostra que ε'_s de primeira ordem (espalhamento simples)

calculado pelo algoritmo apresenta uma boa concordância com o obtido pela simulação MC. As diferenças apresentadas são devido as aproximações consideradas no algoritmo desenvolvido.

C. Otimização analítica do contraste

A figura 3.12 ilustra o modelo empregado no cálculo da intensidade espalhada de primeira ordem.

Figura 3.12: Modelo geométrico empregado na detecção de espalhamento [43].

A otimização foi obtida, por método numérico, através do algoritmo criado. Para isso, foi obtida a intensidade espalhada de primeira ordem em função da variação de dois parâmetros: espectro incidente e distância amostra-detector. Foram utilizados feixes monoenergéticos de 17,5, 20, 35, 45, 60 e 80 keV. Para feixes polienergéticos (figura 3.13), os espectros de energia foram gerados através do programa SpekCalc para a combinação alvo/filtro: W/Cu de 60 kVp (com filtração de Cu de 0,5 mm de espessura) e W/Al de 80 kVp (com filtração de 2,5 mm de Al, e 2 mm de Be), enquanto que a combinação Mo/Mo de 34 kVp (com filtração de 30 μ m de espessura) foi gerada através do algoritmo disponibilizado pelo site da Siemens [76]. O contraste foi obtido para as distâncias amostra-detector no intervalo de 10 a 50 cm, com passos de 10 cm.

Figura 3.13: Espectros polienergéticos utilizados no cálculo do contraste.

Deseja-se saber qual o espectro incidente e a distância amostra-detector que fornecem o maior contraste (C_s) entre os diferentes tecidos mamários. A definição de C_s para os fótons espalhados em uma posição r do detector, devido a diferença entre as distribuições espaciais da energia espalhada provenientes do tecido de interesse e do background (mistura), pode ser dado por [28]

$$C_{s(r)} = 2 \frac{|\varepsilon_{S1}(r) - \varepsilon_{S2}(r)|}{\varepsilon_{S1}(r) + \varepsilon_{S2}(r)} \quad (3.11)$$

onde $\varepsilon_{S1}(r)$ e $\varepsilon_{S2}(r)$ correspondem a distribuição de energia espalhada pela região da mama com o objeto de interesse e com o “background” (mistura) ao invés do objeto de interesse, respectivamente.

É importante considerar a dose (D) entregue a amostra durante a aquisição da imagem por espalhamento. A dose corresponde a energia que é absorvida por 1 Kg de tecido e sua unidade é dada em Gray (1 Gy = 1 J/Kg). A dose a ser administrada depende do número de fótons necessários para identificar os picos do perfil de espalhamento referentes ao carcinoma e tecido fibroglandular, bem como da energia dos fótons de raios X incidentes [77].

3.2.2 Metodologia envolvida na simulação

A. Modelo geométrico

A figura 3.14 ilustra o modelo geométrico empregado na obtenção de imagem por espalhamento de tecidos mamários, este modelo foi baseado no apresentado por Cunha et al. [45]. Um feixe estreito incide perpendicularmente sobre 1 mm^2 da superfície de uma mama comprimida semi-infinita, a qual possui 4 cm de espessura (t) composta por duas camadas de tecido adiposo externas, ambas com 0,5 cm de espessura, e por uma camada central a estas (interna), constituída de tecido misto homogêneo (50% adiposo - 50% glandular).

Figura 3.14: Modelo geométrico empregado na simulação MC para obtenção de imagem por espalhamento de tecidos mamários. Uma mama de superfície semi-infinita com espessura t , era constituída de duas camadas externas de tecido adiposo e uma camada central (interna) de tecido misto homogêneo (50% adiposo - 50% glandular). Um feixe estreito incidia perpendicularmente sobre 1 mm^2 da superfície da mama. Um detector plano ideal de 20 cm de comprimento foi posicionado a uma distância H da superfície inferior da mama [28].

A fim de simular o objeto de interesse a ser investigado, um cilindro com 0.5cm de espessura foi posicionado no centro da mama, ao longo da direção do feixe incidente. Este cilindro foi simulado para diferentes composições de tecidos: glandular, adiposo, carcinoma, e tecido misto composto de 25% adiposo - 75% glandular, e também 25% glandular - 75 % adiposo. Um detector plano ideal foi posicionado a uma distância H da superfície inferior da mama. Foi obtida a distribuição radial de energia espalhada sobre o detector, bem como a distribuição

radial da energia transmitida. Adicionalmente foram obtidas as distribuições espaciais do número de fótons espalhados e transmitidos sob o detector.

B. Dados de entrada

As composições e fatores de forma dos tecidos glandular e adiposo foram retiradas de Poletti et al. [22], enquanto que a composição do carcinoma foi obtida de Poletti et al. [20]. A composição e o fator de forma dos tecidos mistos 50% adiposo - 50% glandular, 25% adiposo - 75% glandular, e também 25% glandular - 75% adiposo, foram obtidos através de uma ponderação média de seus constituintes.

C. Validação

A distribuição radial de energia espalhada sobre o detector, obtida pela simulação, foi comparada com a apresentada por Neitzel et al. [75] com o intuito de validar as implementações realizadas no código PENELOPE e a lógica atribuída ao contador de distribuição radial de energia espalhada. Para tal, foram simulados o modelo geométrico e as condições adotadas por Neitzel et al. [75]. O modelo de referência utilizado foi descrito anteriormente na subseção 3.2.1. A figura 3.11 mostra a intensidade espalhada total apresentada pela literatura de referência com a obtida por simulação MC.

Pode ser observado pela figura 3.15 que ε'_s obtido por simulação MC conseguiu reproduzir a ε'_s fornecida pela literatura de referência, apresentando diferenças menores que 1%.

3.2.3 Geração de imagens otimizadas

A imagem planar da mama por espalhamento foi obtida através de simulação MC para o modelo apresentado pela figura 3.14, utilizando os parâmetros ótimos obtidos pelo algoritmo desenvolvido para o cálculo do contraste (subsubseção 3.2.1). A otimização foi dada pela escolha da distância H e do espectro incidente que apresentaram o maior contraste entre as distribuições radiais da energia espalhada provenientes do tecido de interesse (carcinoma) e do background (mistura).

Figura 3.15: Validação da distribuição radial de energia espalhada obtida por simulação MC para um feixe de 60 keV incidindo em uma amostra de água de 10 cm de espessura. Distância amostra-dector 4 cm e 10^6 histórias. ε'_s foi normalizado pela energia do feixe transmitido e pela área do pixel

4 *Resultados e Discussões*

4.1 Caracterização de um SDRXDE

Nesta seção serão apresentados e discutidos os resultados envolvidos na caracterização de um SDRXDE. Os fatores envolvidos foram divididos em duas subseções. A primeira apresenta a descrição dos fatores compreendidos na correção para a obtenção do μ_s através do espectro espalhado detectado. A segunda subseção compreende a otimização do SDRXDE através do estudo do borramento geométrico e de sua influência no μ_s .

4.1.1 Correções para obtenção de μ_s

Nesta subseção, serão descritos detalhadamente cada um dos fatores de correção. Os resultados apresentados foram obtidos utilizando o material PMMA.

4.1.1.1 Espalhamento múltiplo

Para contabilizar a contribuição do espalhamento múltiplo foi obtido através de simulação MC, o número de fótons espalhados detectados. O espalhamento foi separado em: espalhamento simples e múltiplo (provenientes da amostra) e espalhamento proveniente de fontes espúrias. A figura 4.1 compara essas contribuições com o número total de fótons espalhados. Na simulação foi utilizado o espectro citado na subseção 3.1.1, amostra de PMMA com 12 mm de espessura, colimadores com diâmetro de 1 mm, distância amostra-detector de 9,75 cm e ângulo de espalhamento de 6°.

Os dados da figura 4.1 mostram que 7,8% dos fótons detectados sofreram espalhamento múltiplo, enquanto 0,4% são provenientes de fontes espúrias. Portanto, foi constatado que a contribuição do “background” e do espalhamento múltiplo na amostra é pequena (menor que 8%) para as condições utilizadas neste trabalho [39,44]. A contribuição do espalhamento múltiplo também foi obtida para

Figura 4.1: Distribuições do número de fótons espalhados devido a amostra (espalhamento simples e múltiplo) e provenientes de fontes espúrias, dadas em função da energia. Foi utilizado o espectro de combinação ânodo/filtro W/Cu de 60 kVp (subseção 3.1.1), amostra de PMMA com 12 mm de espessura, $\phi=1$ mm, distância amostra-detector de 9,75 cm e $\theta = 6^\circ$.

espessuras menores que 12 mm. Foi observado que sua contribuição é ainda menor que 7,8%.

4.1.1.2 Correção por auto-atenuação

A figura 4.2 (a) compara a auto-atenuação obtida numericamente (com feixe paralelo e com feixe divergente) com a auto-atenuação obtida na aproximação usual analítica (feixe paralelo) dada pela equação 3.4. Para a obtenção da auto-atenuação numérica, foi utilizada uma largura de feixe incidente de 2 mm, amostra de PMMA com $t=1$ mm e 12 mm, $\phi = 2$ mm e $\theta=6^\circ$. Já a figura 4.2 (b) ilustra o comportamento da auto-atenuação, calculada pela a aproximação analítica, para diferentes espessuras (t) de amostra em função da energia, utilizando $\theta=6^\circ$. A fim de compreender a influência da correção da auto-atenuação no espectro espalhado na figura 4.2 (c) é mostrado o espectro obtido experimentalmente (incluindo espalhamento) normalizado pelo tempo sem nenhuma correção, na mesma figura

é mostrado o espectro corrigido pela auto-atenuação (analítica), para amostras com diferentes espessuras (t). Para a obtenção do espectro espalhado foi utilizado o espectro incidente dado na subseção 3.1.1, amostra de PMMA com variadas espessuras t , colimadores com 2 mm de diâmetro, distância amostra-detector de 9,75 cm.

Foi observado pela figura 4.2(a) que a auto-atenuação numérica considerando um feixe paralelo e um feixe divergente, apresenta comportamento semelhante, com uma diferença relativa menor que 1% para espessuras (t) de 1 e 12 mm. Para espessuras maiores ($t=32$ mm) a diferença relativa foi de 2%, considerando o intervalo de energia entre 10 e 60 keV. Um comportamento similar foi apresentado pela auto-atenuação obtida pela aproximação numérica e analítica. Desta forma, nas condições geométricas adotadas, a auto-atenuação obtida pela aproximação analítica mostra-se como uma correção apropriada para ser aplicada ao espectro medido. É também, a forma mais rápida e simples de calcular este fator.

Como pode ser observado pela figura 4.2(b) a correção afeta fortemente a intensidade do espectro espalhado na faixa de 7 a 29 keV, e possui uma forte dependência com a espessura da amostra. Por exemplo, para $t=1$ mm a auto-atenuação é igual a 0,97, e para $t=12$ mm é 0,72. Ambas para a energia de 40 keV. Também pode ser notado, através da figura 4.2(c), a importância da correção da auto-atenuação no perfil de espalhamento, fazendo com que a intensidade do espectro espalhado não dependa da espessura da amostra.

4.1.1.3 Correção pelo espectro incidente

O espectro incidente medido é mostrado pela figura 4.3. As camadas semi-redutoras obtidas experimentalmente como nas condições já citadas, foram: 1º camada semi-redutora 2,11 mmAl e a 2º camada semi-redutora 5,10 mmAl.

4.2 Obtenção do μ_s

O perfil de espalhamento foi obtido para uma amostra de PMMA com 5 mm de espessura, após aplicar as correções no espectro espalhado detectado. O espectro foi medido para uma distância amostra-detector de 9,75 cm, com colimador de 1

mm de diâmetro e ângulo de espalhamento de 9° . A figura 4.4 mostra os perfis de espalhamento do PMMA obtido por Poletti et al. [20] para um SDRXDA, e por este trabalho para um SDRXDE.

Pode ser observado pela figura 4.4 que os perfis obtidos através de um SDRXDE e por um SDRXDA diferem. O μ_s obtido por um SDRXDA por Poletti et al. [20] apresenta picos mais bem definidos devido a resolução de momento média utilizada ser de $0,08 \text{ nm}^{-1}$. Desta maneira, o estudo do borramento é de extrema importância a fim de otimizar os parâmetros do SDRXDE utilizado.

4.2.1 Borramento geométrico

A validação do algoritmo construído para o cálculo do borramento geométrico foi feita através da comparação com os dados obtidos experimentalmente. O intuito desse algoritmo é analisar o comportamento do borramento com a variação dos fatores geométricos empregados no sistema, de modo a otimizá-lo.

4.2.1.1 Medidas experimentais

Afim de verificar a resolução intrínseca do sistema utilizado ($\Delta\chi/\chi$), foram realizadas medidas experimentais a partir de uma amostra de quartzo (SiO_2) amorfo com 2,79 mm de espessura variando-se três fatores geométricos: abertura dos colimadores, distância entre amostra-detector e ângulo de espalhamento. A figura 4.5 mostra a influência de cada um desses fatores no borramento do SDRXDE utilizado.

O ângulo de espalhamento é um dos fatores mais importantes na construção de um SDRXDE, devido ao fato de sua variação causar a mudança da posição do pico de espalhamento, de acordo com a lei de Bragg. Pode ser inferido através dessa lei que, conforme o ângulo de espalhamento aumenta, o perfil de espalhamento se comprime, uma vez que os picos tendem a se aproximarem quando se deslocam para menores energias assim como mostrado pela figura 4.5 (a). Outro item importante a ser notado na figura 4.5 (a) é a melhora na resolução do sistema com o aumento do ângulo de espalhamento, devido ao ângulo sólido. A resolução obtida foi de 9,8% para $\theta=6^\circ$ e de 5,5% para $\theta=12^\circ$.

Pode ser observado pela figura 4.5(b) que o aumento na abertura de colimação

causa um aumento na intensidade detectada, como também um alargamento na distribuição espalhada detectada devido ao aumento do ângulo sólido propiciando uma pior resolução. A resolução obtida foi de 9,8% para $\phi=1$ mm e de 11,8% para $\phi=2$ mm. Enquanto, na figura 4.5 (c), pode ser observado que, o aumento da distância amostra-detector, resulta em um comportamento oposto ao citado anteriormente. A resolução obtida foi de 13,4% para $D=9,75$ cm e de 9,8% para $D=14,75$ cm.

4.2.1.2 Validação do algoritmo

A validação do borramento do sistema obtido analiticamente foi dada através da comparação com os dados obtidos experimentalmente, como ilustra a figura 4.6.

Como pode ser notado as diferenças dos resultados apresentados pelo algoritmo, considerando o feixe paralelo e divergente, foram pequenas, chegando até à 2% de diferença. Enquanto que, diferenças de até 13% foram obtidas entre os resultados de borramento fornecidos pelo algoritmo e os determinados através de dados experimentais. As diferenças entre os resultados experimentais e analíticos se devem há alguns fatores que não foram considerados em nosso algoritmo, como por exemplo: espectro incidente, auto-atenuação sofrida pelo espectro incidente, eficiência do detector e, também, múltiplo espalhamento.

4.2.1.3 Influência dos fatores no borramento geométrico

Após a validação do algoritmo, o borramento foi calculado para as condições utilizadas na obtenção do μ_s dada pela figura 4.4, sendo obtido um valor de 7%. A figura 4.7 mostra o comportamento do borramento para variadas espessuras, para isso foram fixados alguns parâmetros: $f=2$ mm, $D=9,75$ cm e $14,75$ cm, e $\theta=9^\circ$.

Pode se observar através da figura 4.7 que o borramento não varia com a espessura (t) no intervalo de $0,1 \leq t \leq 1$ cm, já após esse intervalo o borramento apresenta um comportamento linearmente crescente com t .

A figura 4.8 mostra o comportamento do borramento com a variação da espessura da amostra (t) e da largura do feixe incidente (f), para uma das condições utilizadas em nosso trabalho. A figura 4.8 (a) apresenta o comportamento do borramento com a espessura (t), para $\phi=1$ mm, $D=14,75$ cm e $\theta=6^\circ$, considerando

$f=0$. A figura 4.8(b) apresenta o comportamento do borramento com f , para $\phi=1$ mm, $D=14,75$ cm e $\theta=6^\circ$, considerando $t=0$.

Pode ser observado pela figura 4.8 (a) que o borramento praticamente não varia com t no intervalo $0 \leq t \leq 0,9$ cm. Após esse intervalo o borramento apresenta um comportamento linearmente crescente com t . Um comportamento similar é observado pela figura 4.8 (b), onde o borramento é aproximadamente constante entre o intervalo $0,05 \leq f \leq 0,1$ mm. Após esse intervalo o borramento cresce linearmente com o aumento da largura do feixe incidente. O borramento também foi calculado para o caso em que $t=0$ e $f=0$, de modo a considerar a influência da abertura dos colimadores e da distância da amostra ao detector, o valor obtido foi de 3%.

Outro caso, também considerado ideal, é fazer com que cada um dos fatores geométricos (abertura dos colimadores, distância amostra-detector, ângulo de espalhamento e espessura da amostra) variem de maneira independente, de modo a obter o comportamento do borramento em função da variação de cada um desses fatores, como ilustra a figura 4.9.

Pode ser observado pela figura 4.9 (a) que o borramento se mantém constante entre o intervalo de espessura (t) $0 \leq t \leq 0,25$ cm. Após esse intervalo o borramento cresce linearmente com o aumento da espessura. O borramento também cresce linearmente com o aumento da abertura dos colimadores (ϕ), figura 4.9 (b). Na figura 4.9 (c) é mostrado que o borramento decresce com o inverso da distância (D). Comportamento semelhante tem o ângulo (θ) [figura 4.9 (d)]. Porém, o caso considerado pela figura 4.9 é válido apenas para situações onde a distância da amostra ao detector é muito grande, portanto esta aproximação não é válida em nosso trabalho.

4.2.1.4 Otimização do borramento em um SDRXDE

A otimização depende dos parâmetros que são pré-fixados e, também, da porcentagem do borramento intrínseco do sistema que pode ser aceito na realização da medida. O primeiro passo é escolher a região de momento na qual se quer realizar a medida, que depende do ângulo de espalhamento e da distância da amostra ao detector. Assim, por exemplo, para $D=14,75$ cm, $\phi=1$ mm, e $\theta=6^\circ$,

acarretam em um borramento de 3% para $f=0$ e $t=0$ (um ponto de espalhamento). Assim, o primeiro passo é ver a influência da abertura dos colimadores, da distância da amostra ao detector e do ângulo de espalhamento. O segundo passo é ver a influência da espessura da amostra no borramento. Assim para $t=12$ mm, há associado um borramento de 6,8%, como pode ser visto pela figura 4.8 (a), para $f=0$, $D=14,75$ cm, $\phi=1$ mm e $\theta=6^\circ$. O terceiro passo consiste ver a influência da largura do feixe no borramento. Para $f=1$ mm, existe um borramento de 6,7%, como pode ser observado pela figura 4.8 (b), para $t=0$, $D=14,75$ cm, $\phi=1$ mm e $\theta=6^\circ$. O borramento do sistema será dado pela contribuição de cada um dos parâmetros obtidos, sendo calculado pela raiz da soma dos quadrados dos borramentos associados a cada um desses fatores. Ou seja, o borramento é dado por $\sqrt{(3)^2 + (6,8)^2 + (6,7)^2}$, resultando em um valor de 10%. Este resultado era esperado. Está de acordo com os valores experimentais de acordo com a análise da influência da espessura no borramento.

4.3 Obtenção de imagem por espalhamento através de simulação MC

Nesta seção serão abordados os fatores envolvidos na obtenção da imagem por espalhamento através de simulação MC. Esses fatores estão separados em duas subseções: otimização do contraste obtido analiticamente através das diferenças apresentadas pelas distribuições radiais de energia espalhada, provenientes de uma mama contendo carcinoma e tecido 50% adiposo - 50% glandular de mesmo tamanho; e obtenção da imagem por espalhamento através de simulação MC a partir do sistema otimizado. A espessura da mama estudada foi de 4 cm, esta espessura foi escolhida pois é próxima à espessura média (4,2 cm) considerada pela literatura [78].

4.3.1 Otimização analítica do contraste de primeira ordem

A figura 4.10 mostra as distribuições radiais da energia espalhada de primeira ordem (espalhamento simples) pelas regiões da mama com (ε_{s1}) e sem (ε_{s2}) na presença do carcinoma, para um feixe monoenergético de 35 keV e distância amostra-detector de 40 cm.

Pode ser observado pela figura 4.10 que ε_{s1} apresenta dois picos de maior intensidade bem definidos em 3,75 cm e 4,7 cm, enquanto que ε_{s2} somente apresenta um pico mais intenso bem definido em 3,75 cm. As posições em $r=3,75$ cm e 4,65 cm correspondem a um momento transferido de $1,11nm^{-1}$ e $1,6nm^{-1}$, respectivamente. As posições em momento característico dos espalhamentos para os tecidos adiposo e glandular ou carcinoma, são dados respectivamente por $\chi = 1,1nm^{-1}$ e por $\chi = 1,6nm^{-1}$ [2, 20]. Portanto, o primeiro pico detectado em ε_{s1} corresponde ao tecido adiposo e o segundo ao carcinoma.

As distribuições apresentadas por ε_{s1} e ε_{s2} se diferem devido a presença do carcinoma que altera a distribuição espalhada, fazendo com que haja contraste entre estas distribuições. A fim de obter o melhor contraste, as subsubseções a seguir mostram a influência da energia do feixe monoenergético, do espectro polienergético, e da distância H nos cálculos da distribuição radial e do contraste dos fótons espalhados. Os resultados apresentados a seguir foram calculados considerando

uma mama (50% adiposa - 50% glandular) com 4 cm de espessura, contendo um carcinoma em seu centro de 0,5 cm de diâmetro.

4.3.1.1 Influência da energia do feixe monoenergético

A figura 4.11 mostra as distribuições radiais obtidas para diferentes feixes monoenergéticos com energias entre 17,5 keV e 80 keV. Foi utilizada uma distância amostra-detector de 20 cm.

Pode ser observado pela figura 4.11 que as intensidades das distribuições fornecidas pelos feixes de 17,5 e 20 keV são até 100 vezes menores quando comparadas com as intensidades das distribuições entregues pelos demais feixes. Logo, os feixes de 17,5 e 20 keV requerem um maior tempo de medida para se obter a mesma intensidade entregue pelos demais.

A figura 4.12 mostra os valores do contraste dos fótons espalhados (C_s) obtidos para diferentes feixes monoenergéticos com as energias mínima (17,5 keV), média (35 keV) e máxima (80 keV) estudadas.

É observado na figura 4.12 que o valor máximo do contraste dos fótons espalhados ($C_{s,máx}$) é diferente para cada feixe monoenergético, assim como a região radial em que esse valor máximo aparece. Também pode ser notado que o $C_{s,máx}$ foi de 0,6 para 17,5 keV, 0,28 para 35 keV e 0,3 para 80 keV. Apesar do $C_{s,máx}$ de 80 keV ser maior que o de 35 keV, o contraste dos fótons espalhados obtido para a energia de 35 keV é maior que o apresentado pela energia de 80 keV ao longo de quase todo o intervalo de r medido ($1.5 \leq r \leq 10cm$).

Comparando esses valores de $C_{s,máx}$ apresentados neste trabalho com os disponíveis na literatura, foram encontradas algumas divergências. Os valores de $C_{s,máx}$ fornecidos para um feixe de 17,5 keV e um nódulo de 0,5 cm inserido numa mama (50% adiposo - 50% glandular) com 5 cm de espessura, por Taibi et al. [44] e Cunha et al. [28] foram de 0,8 e 0,12, respectivamente. Enquanto que o valor de $C_{s,máx}$ obtido para uma mama com 4,2 cm de espessura contendo um nódulo de 0,05cm e irradiada por um feixe de 35 keV, por Leclair e Johns foi de 0,6 [43]. Essas diferenças eram esperadas de acordo com Cunha et al. [28].

O contraste primário foi calculado para fins de comparação. O contraste primário se mostrou na maioria das vezes menor que o contraste dos fótons

espalhados. Foram estimadas analiticamente as doses cedidas na mama, na condição em que o número de fótons espalhados detectados fosse o mesmo (10^8). Foi obtida uma dose de 19,7 mGy para a energia de 17,5 keV. A dose entregue pela energia de 35 keV foi 20 vezes menor. A dose entregue pela energia de 80 keV foi aproximadamente 60 vezes menor. Como em energias menores que 20 keV o tipo de interação predominate é a absorção fotoelétrica, consequentemente, nessas energias a maioria dos fótons incidentes são absorvidos pela mama o que gera um alto valor de doses [77].

Portanto, como critério de escolha de energia ótima, foi calculada a figura de mérito (FOM) obtida para as energias, dada por $FOM = \frac{C_{s,máx}^2}{D}$. Foi observado que a FOM obtida com a energia de 80 keV é $0,25 \text{ mGy}^{-1}$, sendo 13 vezes maior que a entregue pela energia de 17,5 keV e o dobro da encontrada para a energia de 35 keV. Entretanto, a energia de 35 keV se mostrou a mais adequada para utilização, por possuir uma FOM próxima a de 80 keV e apresentar C_s maior que o apresentado pela energia de 80 keV ao longo de quase todo o intervalo de r medido ($1.5 \leq r \leq 10 \text{ cm}$).

4.3.1.2 Influência do feixe polienergético

Foram obtidas as distribuições radiais, figura 4.13, para feixes provenientes da combinação ânodo/filtro de Mo/Mo e W/Al operando, respectivamente, em 34 kVp e 80 kVp. Os cálculos foram realizados para uma distância amostra-detector de 20 cm.

Como pode ser observado pela figura 4.13 as distribuições radiais apresentadas pelos espectros de 34 e 80 kVp não mostram picos característicos bem definidos como os fornecidos por feixes monoenergéticos. Isso se deve ao fato do espectro possuir uma gama de energias (figura 3.13) fazendo com que uma grande faixa de momentos transferidos chegue a um r , causando assim um borramento na distribuição radial. Também pode ser observado que para o mesmo número de fótons incidentes, a maior intensidade de ε_{s1} é obtido para o espectro de 80kVp quando comparado ao de 34 kVp.

A figura 4.14 apresenta os contrastes obtidos pelas distribuições radiais espalhadas para o feixe monoenergético de energia 80 keV, assim como para os espectros de combinação ânodo/filtro de Mo/Mo e W/Al operando, respectivamente,

em 34 kVp e 80 kVp (figura 3.13).

Como pode ser notado pela figura 4.14 a utilização de um espectro causa alargamento nas distribuições de C_s , comparadas com as distribuições fornecidas pelos feixes monoenergéticos, e também pode ser constatado que a medida que o kVp diminui, os valores de contraste dos fótons espalhados aumentam. O contraste dos fótons espalhados é maior que o primário apenas para uma região de r , sendo esta, variável de acordo com o espectro utilizado. Para o espectro de 34 kVp o valor de $C_{s,máx}$ é 0,073, este é 1,55 vezes maior que o contraste primário, e a região em r onde C_s é maior ou igual ao primário é dada pelo intervalo $0 \leq r \leq 3.73$ cm. Já para o espectro de 80 kVp o valor de $C_{s,máx}$ obtido foi de 0,038, este é aproximadamente 4 vezes maior que o contraste primário, e a região em que C_s é maior que o contraste primário é dada pelo intervalo $0 \leq r \leq 1,7$.

A dose entregue pelos espectros também foi calculada analiticamente, considerando o critério anteriormente citado para feixes monoenergéticos. A dose obtida para o espectro de 34 kVp foi aproximadamente 17 vezes maior em relação a dose obtida pelo espectro de 80 kVp que foi de 0,12 mGy. Foi obtido um valor de FOM de $0,012 \text{ mGy}^{-1}$ para espectro de 80 kVp que é aproximadamente 15 vezes maior que a obtida para o espectro de 34 kVp. Apesar do espectro de 80 kVp apresentar uma maior FOM, o contraste de fótons espalhados é maior que o contraste primário em uma região de r muito pequena, estando em uma região muito próxima ao da intensidade primária transmitida, dificultando assim identificar ambas intensidades. Além disso, o espectro de 80 kVp não carrega informação do efeito de interferência em sua distribuição radial de energia. Por esses motivos, o espectro de 34 kVp se mostrou uma melhor escolha.

4.3.1.3 Influência da distância amostra-detector

No estudo da influência da distância amostra-detector (H) na distribuição radial e no contraste dos fótons espalhados de primeira ordem, foi utilizado um feixe monoenergético afim de diminuir a influência da energia e facilitar a compreensão dos resultados obtidos em função de H . A figura 4.15 apresenta as distribuições radiais espalhadas para a energia de 80 keV em diferentes distâncias amostra-detector (10, 20 e 50 cm).

Pode ser observado na figura 4.15 que o menor H (10 cm) fornece uma maior intensidade na distribuição radial espalhada, possuindo um valor até 1,9 vezes maior que a obtida com $H=20$ cm e 4 vezes maior em relação a obtida com $H=50$ cm. A relação entre H e o ângulo de espalhamento detectado θ pode ser aproximado segundo: $\text{tg}(\theta) = \frac{r}{H + (t/2)}$. Assim, à medida que H aumenta os valores de θ diminuem, e consequentemente, a faixa de momento transferido detectada também diminui, devido a dependência desta com θ . Logo, a distribuição radial espalhada se desloca para maiores valores de r .

A distribuição radial apresentada pela figura 4.15 para $H=10$ cm fornece pouca informação da seção de choque em baixos momentos transferidos, apresentando um pico estreito em baixos momentos, o que prejudica a identificação dos picos característicos do material resultantes do efeito de interferência. Por outro lado, na distribuição radial obtida com $H=20$ cm pode ser notado a presença de picos mais bem definidos, enquanto que a fornecida por $H=50$ cm tem sua distribuição alargada, o que faz com que a intensidade diminua dificultando a visualização dos picos característicos.

A figura 4.16 fornece os contrastes dos fótons espalhados calculados para a energia de 80keV em diferentes distâncias amostra-detector (10, 20 e 50 cm).

A figura 4.16 mostra que a região radial contendo o maior contraste muda juntamente com a alteração de H e que para maiores valores de H essa região tende a se alargar. A distância que apresentou o máximo $C_{s,máx}$ foi a de $H=50$ cm que obteve um valor de 0,31, que é 1,03 vezes maior que o $C_{s,máx}$ apresentado por $H=20$ cm e 1,18 vezes maior que o obtido por $H=10$ cm.

As doses entregues pelos feixes também foram calculadas para cada H , de modo que o número de fótons espalhados detectados fosse o mesmo para os diferentes valores de H . Foi obtida uma dose de 0,77mGy para $H=50$ cm, esta foi 2,14 maior que a obtida para $H=20$ cm e 3,5 vezes maior que a obtida para $H=10$ cm. A FOM obtida para $H=50$ cm foi de $0,125 \text{ mGy}^{-1}$, esta foi metade do valor de FOM obtido para $H=20$ cm e 2,5 vezes menor que a obtida com $H=10$ cm.

As distâncias ótimas foram as de 10 e 20 cm, porém em nosso estudo a distância de 20 cm foi escolhida como ótima, já que além da sua distribuição espalhada radial apresentar picos característicos do material e $C_{s,máx}$ próximo ao

obtido por $H=50$ cm (maior contraste apresentado pelos H estudados), também apresenta uma boa intensidade espalhada detectada.

4.3.2 Imagem otimizada

Os parâmetros ótimos para a obtenção da imagem por espalhamento através de simulação MC foram: espectro de 34 kVp e distância amostra-detector de 20 cm. Os resultados apresentados a seguir foram obtidos considerando uma mama (50% adiposo - 50% glandular) com 4 cm de espessura. A figura 4.17 compara as distribuições radiais espalhadas para a mama contendo um carcinoma com 0,5 cm de diâmetro considerando a radiação detectada proveniente de espalhamento total (simples+múltiplo) e espalhamento simples.

Pode ser observado pela figura 4.17 que a distribuição do espalhamento total é maior que a proveniente de espalhamento simples, chegando a ser até 1,11 vezes maior. A contribuição devido ao espalhamento múltiplo chega a representar até 10% da contribuição total. É importante conhecer a contribuição do espalhamento múltiplo, pois não é possível retirar esta contribuição experimentalmente.

A figura 4.18 mostra a comparação entre os contrastes dos fótons espalhados obtidos por simulação (total) e analiticamente (simples), para uma mama contendo um carcinoma com 0,5 cm de diâmetro.

Pode ser visto através da figura 4.18 que os valores do contraste dos fótons espalhados obtidos analiticamente considerando apenas o espalhamento simples foram maiores dos que os apresentandos pela simulação no intervalo de $0 \leq r \leq 3,6$, apresentando máxima diferença em $r = 0,4$ cm. Após esse intervalo, os valores são iguais até chegar ao intervalo de $7 \leq r \leq 10$ onde esse comportamento volta a se repetir. Essas diferenças ocorrem devido as diferentes distribuições radiais em energia dos tecidos de mama com e sem a presença do carcinoma, obtidas considerando apenas o espalhamento simples e o espalhamento total.

A figura 4.19 dá os valores de contraste dos fótons espalhados para diversos materiais de interesse (tecido adiposo, glandular, 25% adiposo - 75% glandular, 75% diposo - 25% glandular e carcinoma) obtidos por simulação MC considerando a contribuição do espalhamento total detectado.

Na figura 4.19 é possível verificar que o contraste proveniente de um

determinado material de interesse e “background” (50% adiposo - 50% glandular) é diferente. Os valores de $C_{s,máx}$ obtidos, de acordo com o material de interesse utilizado, foram 0,081 para o tecido adiposo, 0,057 para o tecido glandular, 0,04 para a composição 25% adiposo - 75% glandular, 0,041 para a composição 75% adiposo - 25% glandular, e 0,059 para o carcinoma. Essa diferença de contraste já era esperada já que a distribuição radial espalhada depende das propriedades de espalhamento (perfil de espalhamento) do material.

A figura 4.20 mostra os valores de $C_{s,máx}$ obtidos por simulação MC para diferentes tecidos de interesse para $r=0,885$ e $2,69$ cm, e também o valor de contraste primário.

Para uma melhor compreensão, os contrastes dos fótons espalhados fornecidos pela figura 4.20 foram calculados através da equação 3.2.1 sem o módulo, sendo possível assim obter o contraste inverso. O primeiro r corresponde ao momento em que o tecido adiposo é maximizado $\chi = 0,75 \text{ nm}^{-1}$, enquanto que o segundo r corresponde ao que momento em que o carcinoma é maximizado $\chi = 1,6 \text{ nm}^{-1}$. Assim, através da seleção do r pode-se manipular a região em que o tecido de interesse possua um maior contraste.

A figura 4.21 exemplifica a imagem simulada proveniente dos fótons espalhados e originada a partir de uma incidência normal ao plano da mama.

Figura 4.2: Análise da auto-atenuação e de sua influência no perfil de espalhamento para variadas espessuras. (a) Auto-atenuação obtida por difentes aproximações: analítica (feixe paralelo e divergente) e numérica (paralelo), para amostra de PMMA com $t=1$ e 12 mm; (b) auto-atenuação obtida pela aproximação analítica em função da energia; e (c) influência da correção de auto-atenuação (analítica) no espectro espalhado, normalizado pelo tempo

Figura 4.3: Espectro incidente em função de energia obtido para 60 kVp.

Figura 4.4: Perfis de espalhamento do PMMA obtidos para um SDRXDA apresentado por Poletti et al. [20] e para um SRXDE obtido neste trabalho.

Figura 4.5: Medida experimental, normalizada pelo tempo e pela eficiência do detector, com uma amostra de quartzo de 2,79 mm de espessura. (a) Número de contagens em função da energia para $\theta=6$ e 12° , a medida foi realizada em uma distância amostra-detector de 14,75 cm, e com colimadores de 1 mm de diâmetro; (b) número de contagens em função do momento transferido, a medida foi realizada para colimadores de diâmetros de 1 e 2 mm, em uma distância amostra-detector de 9,75 cm, e $\theta=6^\circ$; e (c) número de contagens em função do momento transferido para as distâncias amostra-detector de 9,75 e 14,75cm, foram utilizados colimadores de 2 mm de diâmetro e $\theta=6^\circ$.

Figura 4.6: *Borrimento intrínseco do sistema obtido experimentalmente e por meio do algoritmo, para uma amostra de quartzo com 2,79 mm de espessura. (a) $\theta=6, 9$ e 12° , com abertura de colimação de 1 mm e distância amostra-detector de 14,75 cm; (b) colimadores de 1 mm e 2 mm de diâmetro, com distância amostra-detector de 14,75 cm e $\theta=6^\circ$; e (c) distâncias amostra-detector de 9,75 cm e 14,75 cm, com abertura de colimação de 1 mm e $\theta=12^\circ$.*

Figura 4.7: Borrimento geométrico em função da espessura (t) da amostra, para as distâncias de 9,75 e 14,75cm, e θ de 9° .

Figura 4.8: Borrimento intrínseco do sistema. (a) Borrimento intrínseco em função de t , para $\phi=1$ mm, $D=14,75$ cm e $\theta=6^\circ$, considerando $f=0$; e (b) borrimento intrínseco em função de f , para $\phi=1$ mm, $D=14,75$ cm e $\theta=6^\circ$, considerando $t=0$.

Figura 4.9: Comportamento do borrimento intrínseco do sistema em relação a variados fatores. (a) Variação da espessura da amostra, para $f=0,01$ cm, $\phi=0,05$ cm, $D=74,75$ cm e $\theta=18^\circ$ (b) Variação da abertura dos colimadores, para $f=0,01$ cm, $t=0,1$ cm, $D=74,75$ cm e $\theta=18^\circ$; (c) Variação da distância amostra-detector, para $f=0,01$ cm, $t=0,1$ cm, $\phi=0,05$ cm e $\theta=18^\circ$; e, (d) Variação do ângulo de espalhamento, para $f=0,01$ cm, $t=0,1$ cm, $\phi=0,05$ cm de abertura e $D=74,75$ cm.

Figura 4.10: Distribuições radiais de energia espalhada para uma mama (50% adiposo - 50% glandular) com 4 cm de espessura. ε_{s1} com carcinoma e ε_{s2} sem a presença de um carcinoma de 0,5 cm de diâmetro. Foi utilizado um feixe monoenergético de 35 keV e distância amostra-detector de 40 cm.

Figura 4.11: Distribuições radiais da energia espalhada para uma mama (50% adiposo - 50% glandular) com 4 cm de espessura, contendo um carcinoma de 0,5 cm de diâmetro (ε_{s1}). Para os feixes monoenergéticos entre 17,5 e 80 keV, e distância amostra-detector de 20 cm.

Figura 4.12: Contraste dos fótons espalhados obtido para uma mama (50% adiposo - 50% glandular) com 4 cm de espessura, com e sem a presença de um carcinoma de 0,5 cm de diâmetro, para os feixes monoenergéticos de 17,5 keV, 35 keV e 80 keV, e distância amostra-detector de 20 cm.

Figura 4.13: Distribuições radiais de energia espalhada para uma mama (50% adiposo - 50% glandular) com 4 cm de espessura, na presença de um carcinoma de 0,5 cm de diâmetro, e na ausência do mesmo apenas com o “background” (mistura). (a) Espectro dado pela combinação ânodo/filtro Mo/Mo de 34 kVp, e (b) W/Al operando em 80 kVp. Ambos, para uma distância amostra-detector de 20 cm.

Figura 4.14: Contraste dos fótons espalhados obtidos para uma mama (50% adiposo - 50% glandular) com 4 cm de espessura, com e sem a presença de um carcinoma de 0,5 cm de diâmetro, para um feixe monoenergético de 80 keV, e espectros dados pelas combinações ânodo/filtro Mo/Mo e W/Al, com 34 e 80 kVp, respectivamente. Ambos foram calculados para uma distância amostra-detector de 20 cm.

Figura 4.15: Distribuições radiais de energia espalhada para uma mama (50% adiposo - 50% glandular) com 4 cm de espessura, contendo um carcinoma de 0,5 cm de diâmetro, para $H=10$ cm, 20 cm e 50 cm.

Figura 4.16: *Contraste dos fótons espalhados obtidos para uma mama (50% adiposo - 50 %glandular) com 4 cm de espessura, com e sem a presença de um carcinoma de 0,5 cm de diâmetro. Para $H=10$ cm, 20 cm e 50 cm.*

Figura 4.17: *Distribuições radiais de energia espalhada para uma mama (50% adiposo - 50% glandular) com 4 cm de espessura, contendo um carcinoma de 0,5 cm de diâmetro (ϵ_{s1}), considerando a contribuição proveniente do espalhamento total (simples +múltiplo) e a do espalhamento simples, para o espectro de combinação Mo/Mo de 34 kVp e $H=20$ cm.*

Figura 4.18: *Contraste dos fótons espalhados obtidos por simulação MC (espalhamento total) e analiticamente (espalhamento simples) para uma mama (50%adiposo-50%glandular) com 4 cm de espessura, o carcinoma com 0,5 cm de diâmetro foi considerado como material de interesse, para o espectro proveniente da combinação Mo/Mo de 34 kVp e $H=20$ cm.*

Figura 4.19: *Contrastes dos fótons espalhados obtidos por simulação MC (espalhamento total) para uma mama (50% adiposo - 50% glandular) com 4 cm de espessura, considerando variados materiais de interesse (tecido adiposo, glandular, 25% adiposo - 75% glandular, 75% adiposo - 25% glandular e carcinoma). Para o espectro proveniente da combinação Mo/Mo de 34 kVp e $H=20$ cm.*

Figura 4.20: Valores máximos de contraste dos fótons espalhados obtidos por simulação MC (espalhamento total) considerando variados materiais de interesse (tecido adiposo, glandular, 25% adiposo - 75% glandular, 75% adiposo - 25% glandular e carcinoma), para $r=0,885$ e $2,69$ cm, foi utilizado um espectro proveniente da combinação Mo/Mo de 34 kVp e $H=20$ cm. Também é mostrado o contraste primário (linha pontilhada).

Figura 4.21: Imagem simulada proveniente dos fótons espalhados.

5 *Conclusão e Perspectivas*

5.1 Conclusão

Nosso trabalho analisou detalhadamente os fatores de correção em um SDRXDE para a obtenção do μ_s , mostrando a importância de cada fator. As principais correções foram: Auto-atenuação, espectro incidente, eficiência do detector e espalhamento múltiplo. Os resultados obtidos pelo algoritmo desenvolvido para o cálculo do borramento intrínseco do sistema mostrou uma boa concordância com os resultados experimentais. O algoritmo tem a vantagem de fornecer o borramento do sistema previamente as medidas experimentais, facilitando a otimização de um SDRXDE. Já em relação a parte de imagem planar por espalhamento, o algoritmo desenvolvido para o cálculo do contraste de primeira ordem dos fótons espalhados se mostrou uma ferramenta importante e viável na otimização do contraste, pois a variação dos parâmetros e obtenção dos resultados é feito em um curto intervalo de tempo, enquanto que se a mesma otimização fosse realizado através de simulação MC a obtenção dos resultados levaria dias. Foram obtidas imagens por espalhamento através de simulação MC a partir do sistema previamente otimizado, os resultados alcançados demonstraram a viabilidade experimental da geração destas imagens num ambiente clínico.

5.2 Perspectivas

Com relação as correções e ao estudo do borramento intrínseco do sistema, nosso trabalho focou nas condições empregadas em nosso estudo. Assim, é importante saber se os resultados obtidos por este trabalho se repetem para outras condições. De modo a aprofundar o conhecimento sobre a influência do borramento intrínseco do sistema, novos fatores podem ser estudados, como: espectro incidente e a auto-atenuação. A respeito do sistema de imagem planar por espalhamento,

um estudado mais aprofundado é necessário, de maneira a avaliar a influência da espessura da mama, e tamanho do pixel na distribuição radial obtida, como também no contraste de fótons espalhados. Uma gama maior de espectros também é um fator a ser considerado, assim como a utilização de diferentes geometrias apresentadas pela literatura a fim de otimiza-las.

Referências¹

- [1] INCA. Câncer de mama: é preciso falar disso, 2016.
- [2] G Kidane, RD Speller, GJ Royle, and AM Hanby. X-ray scatter signatures for normal and neoplastic breast tissues. *Physics in Medicine & Biology*, 44(7):1791, 1999.
- [3] Harold Elford Johns. *Physics of radiology*. Charles River Media, 1983.
- [4] Arthur G Haus. The aapm/rsna physics tutorial for residents. measures of screen-film performance. *Radiographics*, 16(5):1165–1181, 1996.
- [5] Alvin I Mushlin, Ruth W Kouides, and David E Shapiro. Estimating the accuracy of screening mammography: a meta-analysis. *American journal of preventive medicine*, 14(2):143–153, 1998.
- [6] Martín Eduardo Poletti. *Análise do contraste, dose e desempenho de uma grade relacionada ao espalhamento na imagem mamográfica*. PhD thesis, Universidade de São Paulo, 1997.
- [7] Gary T Barnes. Contrast and scatter in x-ray imaging. *Radiographics*, 11(2):307–323, 1991.
- [8] André Luiz Coelho Conceição. *Caracterização estrutural de tecidos mamários normais e neoplásicos através de espalhamento de raios X*. PhD thesis, Universidade de São Paulo, 2008.
- [9] Silvia Pani, Emily Cook, Julie Horrocks, Leah George, Sheila Hardwick, and Robert Speller. Modelling an energy-dispersive x-ray diffraction system for drug detection. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 56(3):1238–1241, 2009.
- [10] G Harding. X-ray scatter tomography for explosives detection. *Radiation Physics and Chemistry*, 71(3-4):869–881, 2004.

¹De acordo com a Associação Brasileira de Normas Técnicas. NBR 6023.

-
- [11] G Harding. X-ray diffraction imagingâa multi-generational perspective. *Applied Radiation and Isotopes*, 67(2):287–295, 2009.
- [12] ID Jupp, PT Durrant, D Ramsden, T Carter, G Dermody, IB Pleasants, and D Burrows. The non-invasive inspection of baggage using coherent x-ray scattering. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 47(6):1987–1994, 2000.
- [13] Robert W Madden, Jacob Mahdavi, Richard C Smith, and Ravi Subramanian. An explosives detection system for airline security using coherent x-ray scattering technology. In *Hard X-Ray, Gamma-Ray, and Neutron Detector Physics X*, volume 7079, page 707915. International Society for Optics and Photonics, 2008.
- [14] Robert Speller. Radiation-based security. *Radiation physics and chemistry*, 61(3-6):293–300, 2001.
- [15] George Zentai. X-ray imaging for homeland security. In *2008 IEEE International Workshop on Imaging Systems and Techniques*, pages 1–6. IEEE, 2008.
- [16] J Kosanetzky, B Knoerr, G Harding, and U Neitzel. X-ray diffraction measurements of some plastic materials and body tissues. *Medical physics*, 14(4):526–532, 1987.
- [17] SH Evans, DA Bradley, DR Dance, JE Bateman, and CH Jones. Measurement of small-angle photon scattering for some breast tissues and tissue substitute materials. *Physics in Medicine & Biology*, 36(1):7, 1991.
- [18] Omar S Desouky, Wael M Elshemey, Nabila S Selim, and Ahmed H Ashour. Analysis of low-angle x-ray scattering peaks from lyophilized biological samples. *Physics in Medicine & Biology*, 46(8):2099, 2001.
- [19] Omar S Desouky, Ahmed H Ashour, Mohamed I Abdullah, and Wael M Elshemey. Low-angle x-ray scattering from spices. *Radiation Physics and Chemistry*, 64(4):267–271, 2002.

-
- [20] ME Poletti, OD Gonçalves, and I Mazzaro. Coherent and incoherent scattering of 17.44 and 6.93 keV x-ray photons scattered from biological and biological-equivalent samples: characterization of tissues. *X-Ray Spectrometry*, 31(1):57–61, 2002.
- [21] Wael M Elshemey. X-ray scattering for the determination of fat content in dairy products. *Radiation Physics and Chemistry*, 80(7):779–781, 2011.
- [22] ME Poletti, OD Gonçalves, and I Mazzaro. X-ray scattering from human breast tissues and breast-equivalent materials. *Physics in Medicine & Biology*, 47(1):47, 2001.
- [23] S Pani, EJ Cook, JA Horrocks, JL Jones, and RD Speller. Characterization of breast tissue using energy-dispersive x-ray diffraction computed tomography. *Applied Radiation and Isotopes*, 68(10):1980–1987, 2010.
- [24] DM Cunha, OR Oliveira, CA Perez, and ME Poletti. X-ray scattering profiles of some normal and malignant human breast tissues. *X-Ray Spectrometry*, 35(6):370–374, 2006.
- [25] André Luiz Coelho Conceição, Marcelo Antoniassi, and Martin Eduardo Poletti. Analysis of breast cancer by small angle x-ray scattering (saxs). *Analyst*, 134(6):1077–1082, 2009.
- [26] ALC Conceição, M Antoniassi, DM Cunha, A Ribeiro-Silva, and ME Poletti. Multivariate analysis of the scattering profiles of healthy and pathological human breast tissues. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 652(1):870–873, 2011.
- [27] Wael M Elshemey, Fayrouz S Mohamed, and Ibrahim M Khater. X-ray scattering for the characterization of lyophilized breast tissue samples. *Radiation Physics and Chemistry*, 90:67–72, 2013.
- [28] Diego Merigue da Cunha. *Avaliação da radiação espalhada em mamografia como ferramenta diagnóstica utilizando simulações Monte Carlo*. PhD thesis, Universidade de São Paulo, 2010.

-
- [29] B Ghammraoui, J Tabary, S Pouget, C Paulus, V Moulin, L Verger, and Ph Duvauchelle. New software to model energy dispersive x-ray diffraction in polycrystalline materials. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 664(1):324–331, 2012.
- [30] D O’Flynn, CB Reid, C Christodoulou, MD Wilson, MC Veale, P Seller, D Hills, H Desai, B Wong, and R Speller. Explosive detection using pixellated x-ray diffraction (pixd). *Journal of Instrumentation*, 8(03):P03007, 2013.
- [31] Bernard Dennis Cullity and Stuart R Stock. *Elements of X-ray Diffraction*. Pearson Education, 2014.
- [32] CP Brock, E Arnold, MI Aroyo, A Authier, G Chapuis, Th Hahn, SR Hall, DM Himmel, V Kopskỳ, DB Litvin, et al. *International Tables for Crystallography*. Wiley Online Library, 2018.
- [33] ME Poletti, OD Goncalves, and I Mazzaro. Measurements of x-ray scatter signatures for some tissue-equivalent materials. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 213:595–598, 2004.
- [34] Agostino Tartari, Ernesto Casnati, Claudio Bonifazzi, and Claudio Baraldi. Molecular differential cross sections for x-ray coherent scattering in fat and polymethyl methacrylate. *Physics in Medicine & Biology*, 42(12):2551, 1997.
- [35] Otávio R Oliveira, André LC Conceição, Diego M Cunha, Martin E Poletti, and Carlos A Pelá. Identification of neoplasias of breast tissues using a powder diffractometer. *Journal of radiation research*, 49(5):527–532, 2008.
- [36] Wender Geraldelli, Alessandra Tomal, and Martin E Poletti. Characterization of tissue-equivalent materials through measurements of the linear attenuation coefficient and scattering profiles obtained with polyenergetic beams. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 60(2):566–571, 2013.
- [37] Emily Cook, Ruby Fong, Julie Horrocks, David Wilkinson, and Robert Speller. Energy dispersive x-ray diffraction as a means to identify illicit materials: A

- preliminary optimisation study. *Applied Radiation and Isotopes*, 65(8):959–967, 2007.
- [38] F Marticke, G Montémont, C Paulus, Olivier Michel, JI Mars, and L Verger. Simulation study of an x-ray diffraction system for breast tumordetection. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 867:20–31, 2017.
- [39] ME Poletti, OD Gonçalves, H Schechter, and I Mazzaro. Precise evaluation of elastic differential scattering cross-sections and their uncertainties in x-ray scattering experiments. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 187(4):437–446, 2002.
- [40] Robert Speller. Tissue analysis using x-ray scattering. *X-Ray Spectrometry: An International Journal*, 28(4):224–250, 1999.
- [41] Dean Chapman, W Thomlinson, RE Johnston, D Washburn, E Pisano, N Gmür, Z Zhong, R Menk, F Arfelli, and D Sayers. Diffraction enhanced x-ray imaging. *Physics in Medicine & Biology*, 42(11):2015, 1997.
- [42] Alberto Bravin, Jani Keyriläinen, Manuel Fernández, Stefan Fiedler, Christian Nemoz, Marja-Liisa Karjalainen-Lindsberg, Mikko Tenhunen, Pekka Virkkunen, Marjut Leidenius, Karl Von Smitten, et al. High-resolution ct by diffraction-enhanced x-ray imaging: mapping of breast tissue samples and comparison with their histo-pathology. *Physics in Medicine & Biology*, 52(8):2197, 2007.
- [43] Robert J Leclair and Paul C Johns. Optimum momentum transfer arguments for x-ray forward scatter imaging. *Medical physics*, 29(12):2881–2890, 2002.
- [44] A Taibi, GJ Royle, and RD Speller. A monte carlo simulation study to investigate the potential of diffraction enhanced breast imaging. In *Nuclear Science Symposium, 1999. Conference Record. 1999 IEEE*, volume 3, pages 1378–1382. IEEE, 1999.
- [45] DM Cunha, A Tomal, and ME Poletti. Diffraction enhanced breast imaging through monte carlo simulations. *Nuclear Instruments and Methods in Physics*

- Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 652(1):878–882, 2011.
- [46] Karl Landheer and Paul C Johns. Synchrotron-based coherent scatter x-ray projection imaging using an array of monoenergetic pencil beams. *Review of Scientific Instruments*, 83(9):095114, 2012.
- [47] Francesc Salvat, José M Fernández-Varea, and Josep Sempau. Penelope-2008: A code system for monte carlo simulation of electron and photon transport. In *the Workshop Proceedings, June*, 2008.
- [48] Switzerland CERN. Geant4 user’s guide-for application developers, 2016. Versão: *Geant4*, 10.
- [49] Julio Godeli Neto. *Simulação de mamografia digital por dupla energia para imagens quantitativas*. PhD thesis, Universidade de São Paulo, 2016.
- [50] LN Rothenberg, SA Feig, AG Haus, RE Hendrick, GR Howe, and WW Logan-Young. A guide to mammography and other breast imaging procedures. *A guide to mammography and other breast imaging procedures*, 2004.
- [51] Keith L Moore, Arthur F Dalley, and Anne MR Agur. *Anatomia orientada para a clínica*, volume 7. Guanabara koogan Rio de Janeiro, 2006.
- [52] Stewart C Bushong. *Radiologic Science for Technologists-E-Book: Physics, Biology, and Protection*. Elsevier Health Sciences, 2013.
- [53] Jerrold T Bushberg and John M Boone. *The essential physics of medical imaging*. Lippincott Williams & Wilkins, 2011.
- [54] Emico Okuno, Iberê Luiz Caldas, and Cecil Chow. Física para ciências biológicas e biomédicas. In *Física para ciências biológicas e biomédicas*. 1986.
- [55] Russell K Hobbie and Bradley J Roth. *Intermediate physics for medicine and biology*. Springer Science & Business Media, 2007.

-
- [56] William R Hendee, E Russell Ritenour, and Kenneth R Hoffmann. Medical imaging physics. *Medical Physics*, 30(4):730–730, 2003.
- [57] Ervin B Podgorsak. *Radiation physics for medical physicists*. Springer Science & Business Media, 2010.
- [58] Jens Als-Nielsen and Des McMorro. *Elements of modern X-ray physics*. John Wiley & Sons, 2011.
- [59] Philip Palin Dendy and Brian Heaton. *Physics for diagnostic radiology*. CRC press, 2011.
- [60] Simon R Cherry, James A Sorenson, and Michael E Phelps. *Physics in nuclear medicine e-Book*. Elsevier Health Sciences, 2012.
- [61] Faiz M Khan and John P Gibbons. *Khan’s the physics of radiation therapy*. Lippincott Williams & Wilkins, 2014.
- [62] Reginald William James. The optical principles of the diffraction of x-rays. 1954.
- [63] Arthur James Cochran Wilson. Elements of x-ray crystallography. *ADDISON-WESLEY PUBLISHING CO, READING, MASS. 1970, 256 P*, 1970.
- [64] Bahaa Ghammraoui and Andreu Badal. Monte carlo simulation of novel breast imaging modalities based on coherent x-ray scattering. *Physics in Medicine & Biology*, 59(13):3501, 2014.
- [65] JH Hubbell. Photon mass attenuation and energy-absorption coefficients. *The International Journal of Applied Radiation and Isotopes*, 33(11):1269–1290, 1982.
- [66] J Schelten, , and W Schmatz. Multiple-scattering treatment for small-angle scattering problems. *Journal of Applied Crystallography*, 13(4):385–390, 1980.
- [67] N Freud, P Duvauchelle, SA Pistrucci-Maximean, J-M Létang, and D Babot. Deterministic simulation of first-order scattering in virtual x-ray imaging.

- Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 222(1-2):285–300, 2004.
- [68] AB Ríos, H Somacal, and A Valda. Modeling the interference effect in x-ray coherent scattering by the inclusion of experimental form factors in penelope. In *VI Latin American Congress on Biomedical Engineering CLAIB 2014, Paraná, Argentina 29, 30 & 31 October 2014*, pages 846–849. Springer, 2015.
- [69] Malcom W Chase Jr and NIST-JANAF Thermochemical Tables. Data reported in nist standard reference database 69, june 2005 release: Nist chemistry webbook. *J. Phys. Chem. Ref. Data, Monograph*, 9:1–1951, 1998.
- [70] Leonardo Diniz Hipolito Soares. *Análise de materiais biológicos usando o coeficiente de atenuação linear*. PhD thesis, Universidade de São Paulo, 2015.
- [71] Glenn F Knoll. *Radiation detection and measurement*. John Wiley & Sons, 2010.
- [72] RD Luggar, JA Horrocks, RD Speller, and RJ Lacey. Determination of the geometric blurring of an energy dispersive x-ray diffraction (edxrd) system and its use in the simulation of experimentally derived diffraction profiles. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 383(2-3):610–618, 1996.
- [73] Amptek. Xr-100sdd silicon drift detector (sdd), 2012.
- [74] LRM Morin. Molecular form factors and photon coherent scattering cross sections of water. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 11(4):1091–1098, 1982.
- [75] U Neitzel, J Kosanetzky, and G Harding. Coherent scatter in radiographic imaging: a monte carlo simulation study. *Physics in Medicine & Biology*, 30(12):1289, 1985.
- [76] Siemens. Simulation of x-ray spectra.
- [77] Fanny Marticke. *Optimization of an X-ray diffraction imaging system for medical and security applications*. PhD thesis, Université Grenoble Alpes, 2016.

-
- [78] Martin J Yaffe, Gordon E Mawdsley, and Robert M Nishikawa. Quality assurance in a national breast screening study. In *Application of Optical Instrumentation in Medicine XI*, volume 419, pages 23–31. International Society for Optics and Photonics, 1983.