

Determinação de números atômicos efetivos de materiais radiologicamente equivalentes ao tecido humano e à água

Determination of effective atomic numbers for tissue- and water-equivalent materials

Ana Carolina A. Sirico¹, Audrew Frimaio², Paulo R. Costa¹

¹Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil

²Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN), Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil

Resumo

É conveniente descrever um material composto por vários elementos pelo seu número atômico efetivo, Z_{eff} . No entanto, Z_{eff} não é um número único e deve ser entendido como um parâmetro que depende da energia e que representa os processos de interação de fótons com a matéria. Como tal, o número atômico efetivo pode ser empregado no estudo de materiais radiologicamente equivalentes ao tecido humano e à água. No presente trabalho, cinco amostras radiologicamente equivalentes à água, substância mais abundante no corpo humano, e três amostras radiologicamente equivalentes ao tecido mamário, sendo duas semelhantes ao material que compõe o *objeto simulador* BR12 e uma semelhante ao material que compõe o *objeto simulador* CIRS 70/30, tiveram seus números atômicos efetivos determinados pelo método direto e software Auto- Z_{eff} . As amostras foram comparadas dentro do intervalo de energia para radiodiagnóstico (5-150 keV para simuladores de água e 5-35 keV para simuladores de tecido mamário) com os resultados de seus materiais de referência respectivos. Dentre as cinco amostras equivalentes à água, três apresentaram discrepância de 8% para o método direto e cerca de 10% para o Auto- Z_{eff} . Dentre as amostras equivalentes a tecido mamário, a amostra 47 que simula CIRS 70/30 e a amostra 17 que simula BR12 apresentaram os melhores resultados com diferença relativa média menor que 23%. Ambos os métodos apresentaram variações nos resultados de número atômico efetivo na região de interesse, mas essas discrepâncias não afetam a análise comparativa evidenciando a possibilidade do uso de ambos os métodos em análises comparativas de equivalência de materiais equivalentes ao tecido humano e à água.

Palavras-chave: número atômico efetivo; material tecido-equivalente.

Abstract

It is convenient to describe a material composed of several elements by their effective atomic number, Z_{eff} . However, Z_{eff} is not a single number and should be understood as a parameter that depends on energy and that represents the processes of photon interaction with matter. As such, the effective atomic number can be employed in the study of materials radiologically equivalent to human tissue and water. In the present work, five samples radiologically equivalent to water, most abundant substance in the human body, and three samples radiologically equivalent to breast tissue, two being similar to the material that composes the BR12 phantom and one similar to the material that composes the CIRS 70/30 phantom, had their effective atomic numbers determined by direct method and Auto- Z_{eff} software. The samples were compared within the radiodiagnostic energy range (5-150 keV for water simulators and 5-35 keV for breast tissue simulators) with the results for their respective reference materials. Among the five water-equivalent samples, three presented a discrepancy of 8% for the direct method and about 10% for the Auto- Z_{eff} . Among the samples equivalent to breast tissue, the CIRS 70/30 simulating sample 47 and the BR12 simulating sample 17 presented the best results with a mean relative difference of less than 23%. Both methods presented variations in the results of effective atomic number in the region of interest, but these differences do not affect the comparative analysis highlighting the possibility of using both methods on comparative analysis of equivalence of tissue- and water-equivalent materials.

Keywords: effective atomic number, tissue-equivalent material.

1. Introdução

Ao lidar com um composto ou mistura de moléculas é conveniente descrever o material pelo seu número atômico efetivo, Z_{eff} . Como mostrado por Hine¹, esse número não é único. Para cada processo de interação dos fótons com a matéria, os números atômicos dos elementos presentes no material devem ser ponderados de forma diferente. Sendo assim, é pertinente o uso do número atômico efetivo como parâmetro dependente da energia, e que representa os processos de interação de fótons com o material.

Inicialmente, o número atômico efetivo foi calculado a partir de leis de potência¹. Com o desenvolvimento

de banco de dados de seções de choque de interação² mais detalhados foi possível desenvolver novas metodologias^{3,4} para o cálculo de número atômico efetivo com melhor exatidão para um intervalo amplo de energias.

O estudo do número atômico efetivo como parâmetro foi empregado em diversas aplicações, como em estudos recentes para dosimetria⁵ e blindagem radiológica⁶. Manjunatha e Rudraswamy⁷ determinaram os números atômicos efetivos de 34 tecidos diferentes de órgãos humanos. Singh⁸ determinou o número atômico efetivo para materiais simuladores de tecido humano.

Para que um material seja considerado adequado como simulador de tecido humano⁹, este deve apresentar um comportamento de transmissão da radiação, em função da espessura, muito semelhante ao do material de referência. A água é muitas vezes empregada como material de por sua abundância no corpo humano. Em outros casos, é preciso que estes materiais possuam composição química e número atômico efetivo semelhantes aos tecidos que se deseja simular. Foi desenvolvido um modelo matemático que permite a elaboração de materiais que apresentem propriedades de transmissão à radiação X semelhantes a diferentes tecidos do corpo humano ou à água em diferentes faixas de energia¹⁰.

Um conjunto de cinco amostras radiologicamente equivalentes à água e três amostras radiologicamente equivalentes ao tecido mamário foram desenvolvidas a partir deste modelo¹⁰. Previamente, algumas amostras simuladoras de água tiveram seus coeficientes mássicos medidos a partir de um equipamento de tomografia computadorizada de dupla energia¹¹. As diferenças percentuais relativas em comparação com o coeficiente mássico da água foram menores que 2%.

O número atômico efetivo foi adotado como parâmetro classificador adicional, permitindo a seleção do material equivalente de melhor desempenho para simular o material de referência. Com essa motivação, o presente trabalho determinou os números atômicos efetivos de amostras radiologicamente equivalentes à água e ao tecido mamário.

2. Materiais e Métodos

Um conjunto de oito amostras de materiais radiologicamente equivalentes ao tecido humano e à água na faixa de energias utilizadas em diagnóstico por imagem foi preparado utilizando uma metodologia previamente desenvolvida¹⁰. Cinco amostras identificadas como 29, 31, 33, 38 e 40 simulam água na faixa de energia de 5 a 150 keV. E três são equivalentes ao tecido da mama, no intervalo de 5 a 35 keV. As amostras 17 e 21 simulam o material que compõe o *objeto simulador* comercial BR12¹² (Fluke Biomedical, Co.) e a amostra 47 simula CIRS 70/30¹³ (CIRS, Inc, Newfork, VA), representando 70% de tecido adiposo e 30% de tecido glandular. Os objetos simuladores BR12 e CIRS 70/30 são materiais utilizados como substitutos de tecido mamário para fins de dosimetria e controle de qualidade.

De acordo com a composição elementar de cada amostra foi calculado o número atômico efetivo em função da energia por dois métodos: o método direto³ (na faixa de 5 keV a 100 MeV) e utilizando o software Auto-Z_{eff}⁴ (na faixa de 10 keV a 100 MeV). Os valores de número atômico efetivo obtidos para cada amostra, por estes dois métodos, foram comparados com os de seus respectivos materiais de referência (água líquida², BR12 e CIRS 70/30) na região de interesse para diagnóstico por imagens, de 5 a 150 keV para as amostras equivalente à água e de 5 a 35 keV para as amostras equivalentes ao tecido mamário. A

composição química elementar dos materiais de referência é exibida na Tabela 1.

Tabela 1 - Composição química dos materiais simulados neste trabalho

Item	Composição química (em fração mássica)
Água líquida ²	H: (0.111898); O: (0.888102)
BR12 ¹²	H (8.68); C (69.95); N (2.37); O (17.91); Cl (0.14); Ca (0.95)
CIRS 70/30 ¹³	H: (11.72); C: (73.78); N: (1.30); O: (2.44); Ca: (0.76)

2.1. Método direto

Uma relação geral foi estabelecida para o cálculo do número atômico efetivo de compostos e misturas a partir da seção de choque de interação dos elementos constituintes³. Neste método, o número atômico efetivo é determinado pela equação (1) a partir do coeficiente de atenuação mássico (μ/ρ), fração molar f , número atômico Z e massa atômica A de cada elemento constituinte i .

$$Z_{eff} = \frac{\sum_i f_i A_i (\mu/\rho)_i}{\sum_j f_j (A_j/Z_j) (\mu/\rho)_j} \quad (1)$$

O número atômico efetivo para energia absorvida também pode ser calculado substituindo o coeficiente de atenuação mássico pelo coeficiente mássico de absorção de energia (μ_{en}/ρ), como feito por Shivaramu¹⁴. Neste trabalho, foram utilizados os valores de coeficiente de atenuação mássico obtidos pelo banco de dados NIST XCOM¹⁵ e os valores de massa atômica provém de um relatório técnico da *International Union of Pure and Applied Chemistry* (IUPAC)¹⁶.

2.2. Auto-Z_{eff}

O software Auto-Z_{eff} possui uma interface intuitiva para o cálculo de número atômico efetivo em função da energia, número atômico efetivo médio e número atômico ponderado por espectro. O método explora a correlação entre a seção de choque atômica e número atômico.

No programa, uma matriz foi construída com valores de seção de choque para elementos de número atômico entre 1 e 100 para energias entre 10 keV e 1 GeV. As seções de choque de materiais formados por vários elementos são calculadas por aditividade linear. Os valores de seção de choque são comparados com a matriz de seções de choque em função de Z e o número atômico efetivo é obtido por interpolação dos valores de Z entre as seções de choque adjacentes.

3. Resultados

A variação dos números atômicos efetivos para água líquida, BR12 e CIRS 70/30 são apresentados nas Figura 1-3, respectivamente. Os números foram calculados a partir do método direto e pelo software Auto-Z_{eff} para energias entre 5 keV e 100 MeV e 10 e 100 MeV, respectivamente.

Os números atômicos efetivos para as amostras de materiais radiologicamente equivalentes ao tecido da mama e à água são apresentados nas Figuras 4 e 5.

Figura 1 - Números atômicos efetivos para água líquida a partir do método direto e software Auto-Z_{eff}.

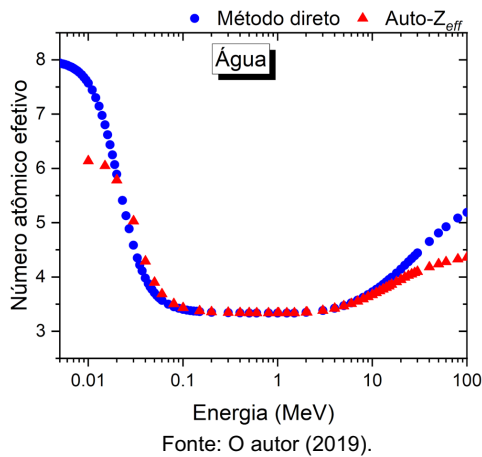


Figura 2 - Números atômicos efetivos para BR12 a partir do método direto e software Auto-Z_{eff}.

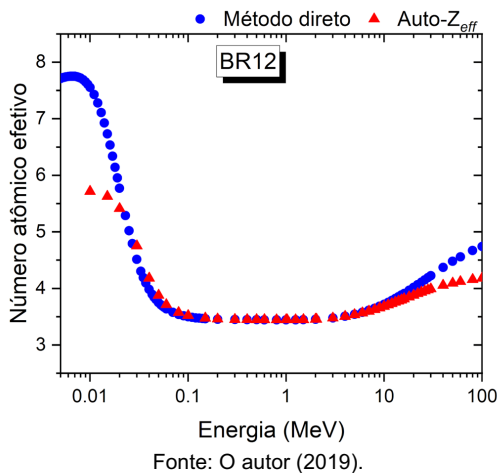
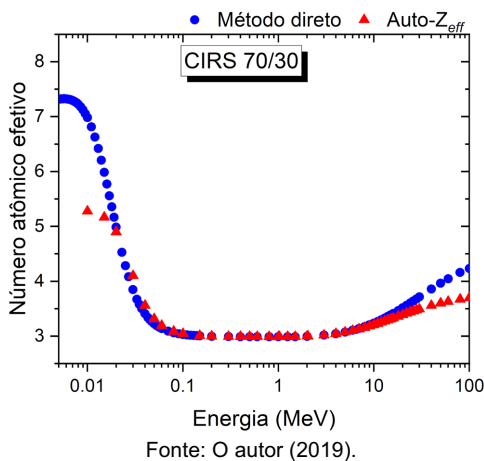


Figura 3 - Números atômicos efetivos para CIRS 70/30 a partir do método direto e software Auto-Z_{eff}.



A fim de comparar os resultados das amostras ao da água líquida, BR12 e CIRS 70/30 calculou-se as diferenças relativas dentro das faixas de energias de

interesse. A comparação para o método direto e Auto-Z_{eff} é mostrada na Figura 5 para as amostras equivalentes à água e na Figura 6 para as amostras equivalentes ao BR12 e CIRS 70/30, respectivamente. A partir dos valores de diferença relativa, pode-se determinar a diferença percentual relativa média das amostras, apresentados nas Tabelas 2 e 3.

Figura 4 - Números atômicos efetivos para amostras 17 (A), 21 (B), 29 (C) e 31 (D) a partir do método direto e software Auto-Z_{eff}.

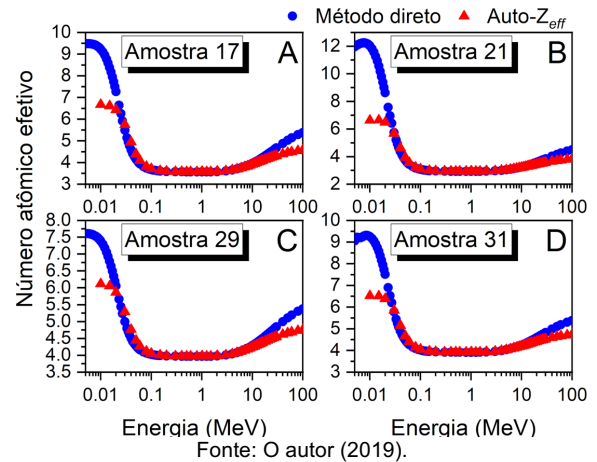
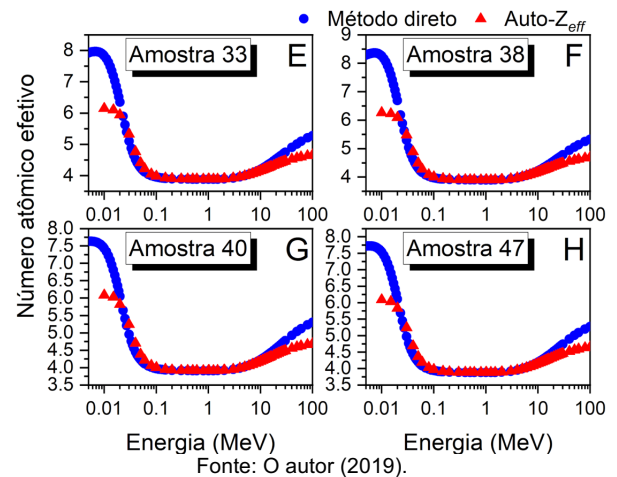


Figura 5 - Números atômicos efetivos para amostras 33 (E), 38 (F), 40 (G) e 47 (H) a partir do método direto e software Auto-Z_{eff}.

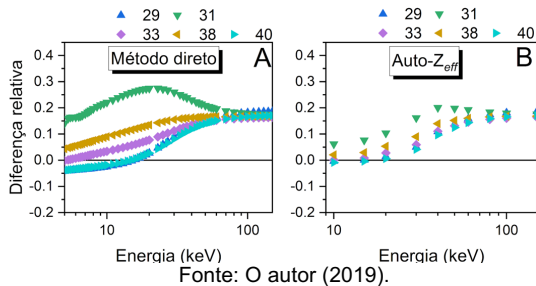


4. Discussão

A variação dos valores de número atômico efetivo com a energia é observada nas Figuras 1-5. Essa variação é resultado das diferentes contribuições das interações dos fótons com a matéria. Na região de baixa energia, o efeito fotoelétrico é dominante. A seção de choque dessa interação é diretamente proporcional a $Z^{4.5}/E^3$, por isso, verifica-se um decréscimo brusco dos valores de número atômico efetivo na região de 10 a 100 keV. Com o aumento das contribuições dos espalhamentos coerente e Compton, os valores permanecem constantes no intervalo de 0.1-5 MeV. Depois dessa região, Z_{eff} aumenta devido ao aumento na contribuição do processo de produção de pares.

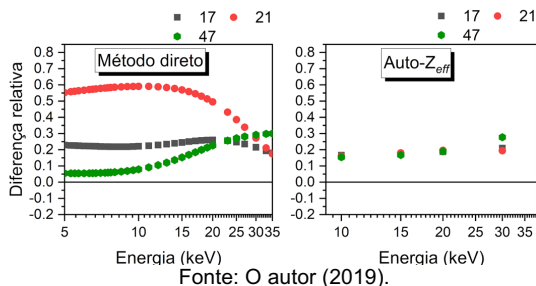
Nas Figuras 1-5, é possível observar discrepâncias nos valores de número atômico efetivo entre os métodos utilizados. Essas discrepâncias também foram verificadas em outros trabalhos comparativos^{8,17,18}. As variações podem ser resultado de parâmetros de entrada diferentes ou ferramentas matemáticas utilizadas em cada um desses métodos.

Figura 5 - Diferença relativa entre as amostras 29, 31, 33, 38 e 40 e água líquida para o método direto (A) e Auto-Z_{eff} (B).



Fonte: O autor (2019).

Figura 6 - Diferença relativa entre as amostras 17 e 21 e BR12 e amostra 47 e CIRS 70/30, para o método direto (A) e Auto-Z_{eff} (B).



Fonte: O autor (2019).

Tabela 2 - Diferença percentual relativa média para as amostras 29, 31, 33, 38 e 40 equivalentes a água.

Amostra	Material de referência	Diferença relativa média (%)	
		Método direto (5 a 150 keV)	Auto-Z _{eff} (10 a 150 keV)
29	Água líquida	8	10
31	Água líquida	21	15
33	Água líquida	8	10
38	Água líquida	12	12
40	Água líquida	8	9

Fonte: O autor (2019).

Tabela 3 - Diferença percentual relativa média para as amostras 17 e 21 equivalentes ao BR12 e amostra 47 equivalente ao CIRS 70/30.

Amostra	Material de referência	Diferença relativa média (%)	
		Método direto (5 a 35 keV)	Auto-Z _{eff} (10 a 35 keV)
17	BR12	23	19
21	BR12	52	18
47	CIRS 70/30	13	20

Fonte: O autor (2019).

Nas Figuras 5 e 6, as diferenças relativas entre os números atômicos efetivos dos materiais de referência e das amostras equivalentes são apresentadas. Na Figura 5, podemos verificar, no intervalo de energia de 5-150 keV, que as amostras são equivalentes à água dentro de 12% com exceção da amostra 31, cuja diferença relativa atinge 20%. Dentre todas as amostras simuladoras de água, as

amostras 29, 33 e 40 apresentaram os melhores resultados de equivalência, com diferença percentual relativa média de 8% para o método direto e cerca de 10% para o Auto-Z_{eff}. Na Figura 6, podemos verificar que, no intervalo de energia de 5-35 keV, a amostra 47 é compatível ao CIRS 70/30, apresentando 13% de diferença relativa média para o método direto e 20% para o Auto-Z_{eff}. Além disso, a amostra 17 é a que melhor representa o BR12 com 23% de diferença percentual relativa para o método direto e 19% para o Auto-Z_{eff}.

5. Conclusões

No presente trabalho, foram determinados os números atômicos efetivos de cinco amostras radiologicamente equivalentes a água e três amostras radiologicamente equivalentes ao tecido mamário, sendo duas simuladoras de BR12 e uma de CIRS 70/30, a partir de dois métodos (método direto e software Auto-Z_{eff}). Foi possível observar variações nos valores de número atômico efetivo entre os métodos utilizados na região em que o efeito fotoelétrico é dominante.

Os resultados de Z_{eff} foram comparados com a água líquida no intervalo de 5-150 keV e BR12 e CIRS 70/30 no intervalo de 5-35 keV.

As amostras equivalentes à água líquida apresentaram discrepância menor que 13% com exceção da amostra 31 no método direto. As amostras 29, 33 e 40 exibiram os resultados com maior equivalência à água, apresentando diferença relativa média de 8% para o método direto e cerca de 10% para o Auto-Z_{eff}.

Dentre as amostras equivalentes ao tecido mamário, a amostra 47, que simula CIRS 70/30, e a amostra 17, que simula BR12, apresentaram os melhores resultados com diferença relativa média menor que 23%.

Os métodos apresentaram variações nos resultados de número atômico efetivo na região de interesse, mas essas discrepâncias não afetam a análise comparativa, evidenciando a possibilidade do uso de ambos os métodos em análises comparativas de equivalência de tecidos.

Agradecimentos

Os autores agradecem à CNEN (processo 01341.000947/2018), à FAPESP/PIPE (processo 2017/24999-8) e ao Prof. Rick Franich do Instituto Real de Tecnologia de Melbourne por ceder o software Auto-Z_{eff} para este trabalho.

Referências

- Hine GJ. The effective atomic numbers of materials for various gamma ray processes. Phys Rev. 1952;85:725.
- Hubbell JH, Seltzer SM. NIST standard reference database 126. Gaithersburg, MD: National Institute of Standards and Technology. 1996.
- Manohara SM, Hanagodimath SM, Thind KS, Gerward L. On the effective atomic number and electron density: a comprehensive set of formulas for all types of materials and energies above 1 keV. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 2008;266(18):3906-12.

4. Taylor ML, Smith RL, Dossing F, Franich RD. Robust calculation of effective atomic numbers: The Auto-Zeff software. *Medical physics*. 2012;39(4):1769-78.
5. Singh VP, Badiger NM. Effective atomic numbers of dosimetric interest organic compounds. *Indian Journal of Pure & Applied Physics (IJPAP)*. 2016;54(5):333-8.
6. Tekin HO, Altunsoy EE, Kavaz E, Sayyed MI, Agar O, Kamislioglu M. Photon and neutron shielding performance of boron phosphate glasses for diagnostic radiology facilities. *Results in Physics*. 2019;12:1457-64.
7. Manjunatha HC, Rudraswamy B. Study of effective atomic number and electron density for tissues from human organs in the energy range of 1 keV–100 GeV. *Health physics*. 2013;104(2):158-62.
8. Singh VP, Badiger NM. Effective atomic numbers of some tissue substitutes by different methods: a comparative study. *Journal of Medical Physics/Association of Medical Physicists of India*. 2014;39(1):24.
9. White DR, Booz J, Griffith RV, Spokas JJ, Wilson IJ. Report 44. *Journal of the International Commission on Radiation Units and Measurements*. 1989;os23(1).
10. Mariano L, Costa PR. Desenvolvimento de uma metodologia para formulação de materiais radiologicamente equivalentes ao tecido humano. Tese de Doutorado. São Paulo: Universidade de São Paulo; 2017.
11. Sirico ACA, Frimaio A, Nersissian DY, Costa PR. Determinação das propriedades de atenuação de materiais radiologicamente equivalentes a tecidos humanos utilizando um equipamento DECT. *Revista Brasileira de Física Médica*. 2019;12(2):14.
12. White DR, Martin RJ, Darlison R. Epoxy resin based tissue substitutes. *The British Journal of Radiology*. 1977;50(599):814-21.
13. Poletti ME, Gonçalves OD, Mazzaro I. X-ray scattering from human breast tissues and breast-equivalent materials. *Physics in Medicine & Biology*. 2001;47(1):47.
14. Shivaramu, Ramprasath V. Effective atomic numbers for photon energy absorption and energy dependence of some thermoluminescent dosimetric compounds. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 2000;168(3):294-304.
15. Berger MJ, Hubbell JH, Seltzer SM, Chang J, Coursey JS, Sukumar R, Zucker DS, Olsen K. XCOM: Photon Cross Section Database (version 1.5) [Internet]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.; 2010 [acesso 2019 Abr 8]. Available from: <http://physics.nist.gov/xcom>.
16. Wieser ME, Holden N, Coplen TB, Böhlke JK, Berglund M, Brand WA, et al. Atomic weights of the elements 2011 (IUPAC Technical Report). *Pure and Applied Chemistry*. 2013;85(5):1047-78.
17. Singh VP, Badiger NM, Kucuk N. Determination of effective atomic numbers using different methods for some low-Z materials. *Journal of Nuclear Chemistry*. 2014;2014.
18. Singh VP, Badiger NM, Kucuk N. Assessment of methods for estimation of effective atomic numbers of common human organ and tissue substitutes: waxes, plastics and polymers. *Radioprotection*. 2014;49(2):115-21.

Contato:

Autor Correspondente:

Ana Carolina Albernaz Sirico

Grupo de Dosimetria das radiações e Física Médica
Departamento de Física Nuclear do Instituto de Física da USPE-mail: ana.sirico@usp.br

Audrew Frimaio

Grupo de Dosimetria das radiações e Física Médica
Departamento de Física Nuclear do Instituto de Física da USPE-mail: audrew@if.usp.br

Paulo Roberto Costa

Grupo de Dosimetria das radiações e Física Médica
Departamento de Física Nuclear do Instituto de Física da USPE-mail: pcosta@if.usp.br