

Cálculo del número atómico efectivo parcial y total de tejidos mamarios sanos y malignos

Ernesto R. Custidiano[¶], Mercedes R. Valenzuela

Departamento de Física, FaCENA, UNNE, Corrientes, Argentina.

Recibido 06 de mayo de 2013. Aprobado 12 de septiembre de 2013.

CALCULATION OF THE EFFECTIVE ATOMIC NUMBER PARTIAL AND TOTAL OF HEALTHY AND MALIGNANT BREAST TISSUES

CÁLCULO DO NÚMERO ATÔMICO EFETIVO TOTAL E PARCIAL DOS TECIDOS MAMÁRIOS SAUDÁVEIS E MALIGNAS

Resumen — Se calcularon los números atómicos efectivos totales y parciales de tejidos mamarios sanos y malignos, utilizando el software WinXcom y su base de datos; en el rango de energía de $10 \text{ keV} \leq E \leq 500 \text{ keV}$. Los cálculos realizados, correspondientes a los procesos microscópicos relevantes involucrados, muestran que mediante los mismos es posible describir y diferenciar los tejidos mamarios sanos y malignos entre sí.

Palabras Claves — Cáncer de mama, Coeficientes de atenuación másico de fotones, Número atómico efectivo, Tejido mamario.

Abstract — We calculated effective atomic numbers partial of healthy and malignant breast tissues, using WinXcom software and database, in the energy range $10 \text{ keV} \leq E \leq 500 \text{ keV}$. Calculations corresponding to the relevant microscopic processes involved, show that is possible describe and differentiate healthy and malignant breast tissues each other using partial effective atomic numbers

Keywords — Breast cancer, Mass attenuation coefficients of photons, Effective atomic number, Breast tissue.

Sumário — Os números atômicos total e parciais de tecidos mamários saudáveis e malignas foram calculados utilizando o software WinXcom e o seu banco de dados, na faixa de energia de $10 \text{ keV} \leq E \leq 500 \text{ keV}$. Os cálculos realizados, correspondentes aos processos microscópicos relevantes envolvidos mostram que pode-se descrever e diferenciar os tecidos mamários saudáveis e malignas.

Palavras-chave — câncer de mama, coeficientes de atenuação de massa dos fótons, número atômico efetivo, tecido mamário.

I. INTRODUCCIÓN

Durante años la comunidad científica ha dedicado considerables esfuerzos, teóricos y experimentales para comprender y explicar los mecanismos que intervienen en el proceso de interacción de radiación con la materia [1]. Estos están bien entendidos y aplicados actualmente. Un campo de aplicación de los conceptos y métodos

desarrollados es la medicina; en la cual se han desarrollado una variedad de dispositivos y metodologías para el uso de las radiaciones como herramienta para el diagnóstico y tratamiento de ciertas enfermedades. Entre otras se incluye: mamografía, tomografía computarizada, diagnóstico de rayos X, tomografía por emisión de positrones (PET), radioterapia, medicina nuclear, aceleradores lineales).

[¶] Dirección para correspondencia: ernesto7661@gmail.com

DOI: <http://dx.doi.org/10.14508/rbme.2013.7.14.24-29>

Un aspecto importante de la medicina de diagnóstico, por ejemplo, es la diferenciación entre los tejidos sanos y enfermos. Es posible el desarrollo de una metodología relacionada con la interacción de las radiaciones de bajas energías con la materia para lograr esta diferenciación. La misma se basaría en conceptos simples, tales como los mecanismos macroscópicos y microscópicos implicados en el proceso de interacción de las radiaciones con materiales compuestos, y aproximaciones como la regla de las mezclas y el número atómico efectivo. En este trabajo se propone la utilización de los números atómicos efectivos parciales, $Z_{\text{eff}}^{\text{pe}}$, $Z_{\text{eff}}^{\text{R}}$, $Z_{\text{eff}}^{\text{C}}$ y $Z_{\text{eff}}^{\text{pf}}$ correspondientes a los procesos microscópicos de efecto fotoeléctrico (pe), dispersión Rayleigh (R), dispersión Compton (c) y formación de pares (pf), respectivamente, para diferenciar entre tejidos mamarios sanos y malignos que interaccionan con fotones cuyas energías se encuentran en el intervalo $10 \text{ keV} \leq E \leq 500 \text{ keV}$, y, en general, para tejidos biológicos que difieren en su composición en la concentración de elementos pesados (Ca, Cl, K, Rb, Zn, Fe).

II. MATERIALES Y MÉTODOS

Además del coeficiente de atenuación lineal, en la descripción y diferenciación de tejidos sanos y malignos, puede utilizarse el número atómico efectivo total, Z_{eff} y los números atómicos efectivos parciales, $Z_{\text{eff}}^{\text{pe}}$, $Z_{\text{eff}}^{\text{R}}$, $Z_{\text{eff}}^{\text{C}}$ y $Z_{\text{eff}}^{\text{pf}}$, para describir el complejo proceso de interacción de los fotones con materiales compuestos. Es generalmente aceptado que un único número no puede representar el número atómico en todo el rango de energía, para todas las interacciones de fotones con la materia [2].

Este trabajo se fundamenta en la hipótesis de que con una combinación adecuada de los valores de los parámetros que describen un haz de fotones y el material absorbente, tales como energía del haz, la composición del tejido y concentración de elementos pesados, es posible diferenciar entre tejidos biológicos semejantes que difieren en las concentraciones de metales pesados. Por ejemplo, en el caso de tejidos mamarios sanos y malignos, estos últimos poseen una mayor concentración de elementos pesados, tales como Ca, Cl, K, Rb, Zn, Fe [3-4]. Considerando la dependencia funcional de la sección eficaz para procesos microscópicos de Rayleigh ($\sigma^{\text{R}} \sim Z^n/E^m$, $2 < n < 3$; $m = -2$) y efecto fotoeléctrico ($\sigma^{\text{pe}} \sim Z^n/E^m$, $4 < n < 5$; $m = -3$) [5]. Respecto de la energía del fotón y su número atómico, es razonable suponer que es posible observar una diferencia entre los números atómicos efectivos parciales, correspondiente a los procesos microscópicos relevantes en la interacción de fotones de bajas energías y tejidos mamarios sanos y malignos.

Las medidas realizadas por Woodard y White [6] en tejidos mamarios sanos y malignos del coeficiente de atenuación lineal, utilizando un haz de fotones polienergético, muestran la existencia de diferencias detectables entre el coeficiente de atenuación lineal del tejido mamario sano y el del carcinoma ductal infiltrante, para energías del orden de $E \sim 30 \text{ keV}$. [6]

En este estudio, en particular, se utiliza la composición del tejido mamario normal y maligno, detallada en la Tabla 1 [3-4].

El uso del número atómico efectivo para describir la interacción de un haz de fotones con materiales compuestos implica la suposición que los átomos constituyentes de las moléculas del material pueden ser representados por un conjunto de átomos idénticos, cada uno con un número efectivo de electrones Z_{eff} . Esta hipótesis, de hecho, implica una sección eficaz efectiva por átomo σ_a y una sección eficaz efectiva por electrón, σ_e , simulando un material compuesto con un único tipo de "átomo" con número atómico igual al número atómico efectivo Z_{eff} . Verificándose la siguiente expresión [7]:

$$Z_{\text{eff}} = \frac{\sigma_a}{\sigma_e} \quad (1)$$

Los números atómicos efectivos totales y parciales de tejidos de mamarios sanos y malignos se calcularon utilizando el método directo [7]. Este método, según lo demostrado por Manohara y colaboradores [7], es apropiado por su simplicidad y exactitud. Recientemente Taylor y colaboradores [8-9] publicaron cálculos del número atómico efectivo total, para diferentes tejidos sanos y malignos, utilizando una aproximación dependiente de la energía. Los valores que obtuvieron, para tejidos mamarios sanos y malignos se diferencian en la zona de energía en la cual predomina el efecto fotoeléctrico.

En este trabajo se utiliza el método directo para el cálculo de los números atómicos efectivos totales y parciales, para tejidos mamarios sanos y malignos. Este método requiere, además de la sección eficaz atómica efectiva, la sección eficaz electrónica, lo que lo hace apropiado para el cálculo de número atómico efectivo según Yang y colaboradores [10].

Para el cálculo de número atómico efectivo total se utilizó la siguiente fórmula:

$$Z_{\text{eff}} = \frac{\sigma_a}{\sigma_e} = \frac{\sum_i n_i \sigma_i}{\sum_i \frac{n_i \sigma_i}{Z_i}} \quad (2)$$

Donde σ_a es la sección eficaz (promedio) por átomo, σ_e es la sección eficaz (promedio) por electrones; n_i , σ_i y Z_i son el número de átomos, la sección eficaz total y el número atómico del átomo i -ésimo, constituyente de la molécula, respectivamente. Los valores de $\sigma_{a \text{ total}}$ y σ_e , se calcularon utilizando la base de datos WinXcom [11-13].

Para el cálculo de número atómico efectivo parcial (efecto fotoeléctrico, dispersión Rayleigh, dispersión compton) se utilizaron las siguientes fórmulas:

$$Z_{\text{eff}}^{pe} = \frac{\sigma_a^{pe}}{\sigma_e^{pe}} = \frac{\sum_i n_i \sigma_i^{pe}}{\sum_i \frac{n_i \sigma_i^{pe}}{Z_i}} \quad (3)$$

$$Z_{\text{eff}}^R = \frac{\sigma_a^R}{\sigma_e^R} = \frac{\sum_i n_i \sigma_i^R}{\sum_i \frac{n_i \sigma_i^R}{Z_i}} \quad (4)$$

$$Z_{\text{eff}}^C = \frac{\sigma_a^C}{\sigma_e^C} = \frac{\sum_i n_i \sigma_i^C}{\sum_i \frac{n_i \sigma_i^C}{Z_i}} \quad (5)$$

Donde n_i , σ_i^{pe} , σ_i^R , σ_i^C , σ_i^{pf} , y Z_i son el número del átomo, las secciones eficaces parciales y el número atómico del átomo i -ésimo, constituyente de la molécula, respectivamente. Los valores de las secciones eficaces parciales se calcularon utilizando la base de datos WinXcom [11-13].

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

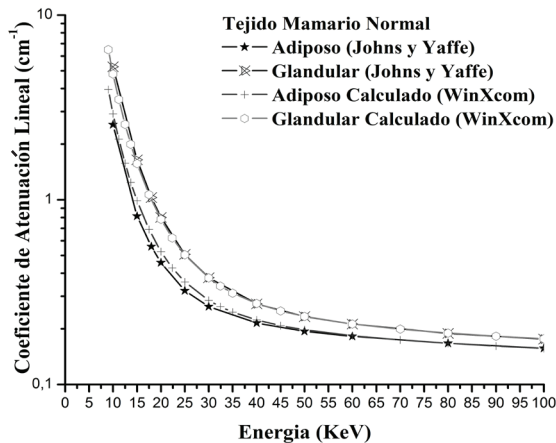


Fig. 1. Comparación de los coeficientes de atenuación lineal del tejido mamario sano, los calculados con WinXcom y los medidos experimentales por Johns y Yaffe. Error inferior al 8%.

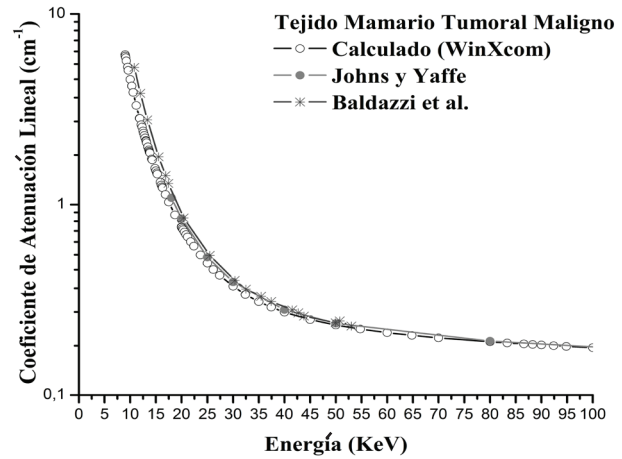


Fig. 2. Comparación de los coeficientes de atenuación lineal del tejido mamario tumoral maligno, los calculados con WinXcom calculados y los medidos experimentales por Johns y Yaffe; y Baldazzi. Error inferior al 7%.

A. Validación del método

El conocido programa WinXcom [11-13] fue empleado para calcular el número atómico efectivo en el rango de energía $10 \text{ keV} \leq E \leq 150 \text{ keV}$ utilizando las secciones eficaces de interacción de fotones con átomos. El programa posee una base de datos de coeficientes de atenuación lineal totales y parciales, como así también secciones eficaces para los siguientes procesos: dispersión incoherente, dispersión coherente, absorción fotoeléctrica y producción de pares.

A los efectos de validar el método utilizado, se calculó con el software de WinXcom, el coeficiente de atenuación lineal del tejido mamario sano y maligno, utilizando la composición detallada en la Tabla 1, en el rango de energía de $10 \text{ keV} \leq E \leq 150 \text{ keV}$.

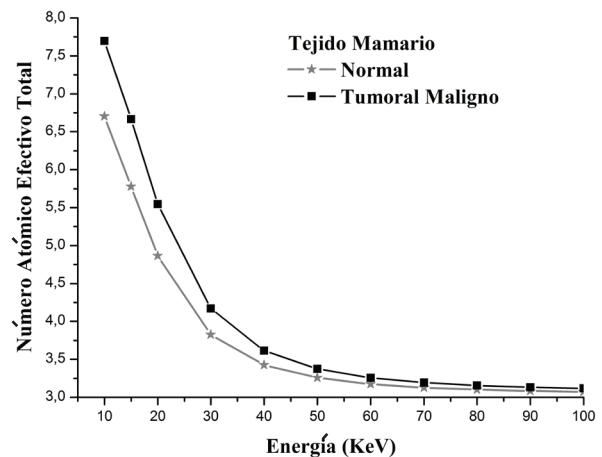


Fig. 3. Número atómico efectivo total calculado de tejido mamario sano y tejido mamario tumoral maligno.

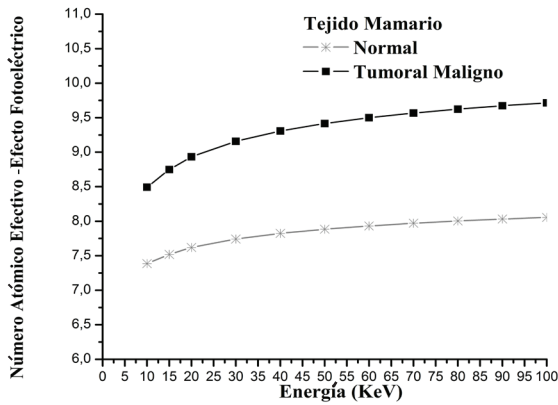


Fig. 4. Número atómico efectivo calculado para efecto Fotoeléctrico de tejido mamario sano y tejido mamario tumoral maligno.

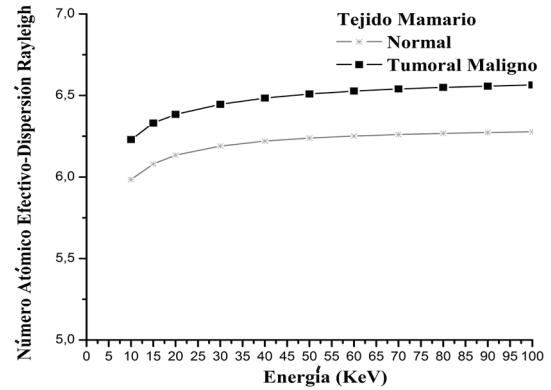


Fig. 5. Número atómico efectivo calculado para dispersión de Rayleigh de tejido mamario sano y tejido mamario tumoral maligno.

Tabla 1. Composición de Tejido Mamario Sano y Maligno [3-4].

Constituyentes del Tejido	Número Atómico	Tejido Mamario Normal densidad (1,040 g/cm ³) átomos /molécula	Tejido Mamario Maligno densidad (1,060 g/cm ³) átomos /molécula
H	1	1	1
C	6	5,3903E-1	5,3903E-1
N	7	7,5709E-3	7,5709E-3
O	8	7,2104E-2	7,2104E-3
Na	11	1,5919E-3	3,1193E-3
Al	13	4,8806E-3	7,5734E-6
Cl	17	1,0994E-3	2,1741E-3
K	19	4,5118E-4	1,7990E-3
Ca	20	4,0817E-5	1,0084E-4
Mn	25	1,3931E-7	2,0645E-7
Fe	26	3,4625E-5	5,0443E-5
Co	27	6,8848E-8	1,2.48E-7
Zn	30	3,5255E-6	6,2331E-6
Br	35	1,7472E-6	2,9417E-6
Rb	37	1,3810E-6	2,4491E-6
Cs	55	4,8566E-10	9,7133E-10

En las Fig. 1 y Fig. 2 se comparan los valores de los coeficientes de atenuación lineal de los tejidos mamaros sanos y malignos calculados por el programa WinXcom y los medidos experimentalmente [14, 15]. En los mismas se observan que los resultados calculados concuerdan bien con los valores medidos, con una diferencia inferior al 8% entre el coeficiente de atenuación lineal del tejido mamario sano calculado, y el medido experimentalmente por Johns and Yaffe [14]; y una diferencia inferior al 7% en el caso del coeficiente de atenuación lineal del tejido mamario maligno, calculado

y el medido experimentalmente por Johns and Yaffe [14] y Baldazzi [15].

B. Número atómico efectivo total y parcial de tejidos mamaros sanos y malignos

Se espera que la interacción de un haz de fotones de baja energía ($10 \text{ keV} \leq E \leq 150 \text{ keV}$) con tejidos biológicos de diferentes composición en elementos pesados, muestren diferencias en los coeficientes de atenuación correspondientes a los diferentes procesos microscópicos involucrados. Las Figs. 3, 4, 5 y 6 muestran

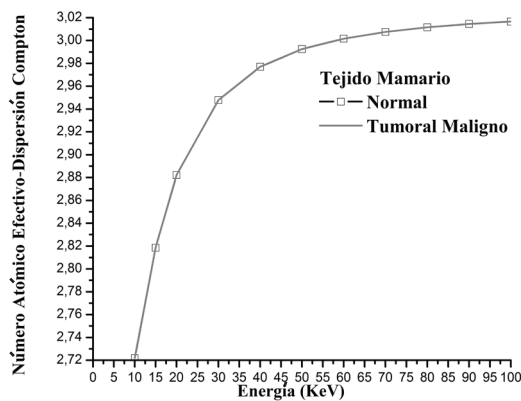


Fig. 6. Número atómico efectivo calculado para dispersión Compton de tejido mamario sano y tejido mamario tumoral maligno.

los números atómicos efectivos, totales y parciales, $Z_{\text{eff}}^{\text{pe}}$, $Z_{\text{eff}}^{\text{R}}$ y $Z_{\text{eff}}^{\text{C}}$ de tejido mamario sano y maligno, calculados con WinXcom, utilizando la composición detallada en la Tabla 1.

En las mismas se observa una pequeña diferencia en el número atómico efectivo total, Z_{eff} , (Fig. 3). Mientras que las Figs. 4 y 5 muestran que los procesos microscópicos responsables de las diferencias observadas entre estos tejidos es el efecto fotoeléctrico, $Z_{\text{eff}}^{\text{pe}}$, y en menor medida la dispersión de Rayleigh, $Z_{\text{eff}}^{\text{R}}$. Los efectos observados se deben al rango de energías considerado de los fotones, en el cual el proceso fotoeléctrico posee mayor probabilidad de ocurrir y a la concentración de elementos pesados. Finalmente, la Fig. 6 muestra que el proceso Compton, $Z_{\text{eff}}^{\text{C}}$ no es relevante en la diferenciación de estos tejidos, para las condiciones establecidas, esto es previsible y se explica mediante la dependencia funcional del citado proceso respecto al rango de energía y número atómico.

Las Figs. 4 y 5 muestran los resultados más importantes de este trabajo, confirmando la hipótesis inicial de que una combinación adecuada del conjunto de valores de parámetros que caracterizan un haz de fotones y un material absorbente, tales como energía del haz y concentración de elementos pesados, en principio, deberían describir y diferenciar satisfactoriamente los tejidos biológicos semejantes que difieren en su composición relativa de metales pesados. En este trabajo se analizó el caso de la interacción de un haz de fotones de bajas energías y tejidos mamarios sanos y malignos. Estos últimos difieren en las concentraciones de elementos de altos Z , tales como Ca, Cl, K, Rb, Zn, Fe [3,4].

Las Figs. 4 y 5 muestran que las pequeñas diferencias observadas en el número atómico efectivo total, Z_{eff} (Fig. 3) para tejidos mamarios sanos y malignos se exaltan y resuelven apreciablemente con los números

atómicos efectivos parciales, correspondientes al proceso fotoeléctrico (Fig. 4). El efecto fotoeléctrico resultó ser el proceso relevante, y una pequeña diferencia en el caso de dispersión de Rayleigh (Fig.5), los cuales concuerdan muy bien con los cálculos reportados por Taylor [9] en la región de bajas energías, resolviendo y confirmando que el proceso relevante es el efecto fotoeléctrico y en menor medida la dispersión de Rayleigh. Estas diferencias se deben, principalmente, a que los citados procesos microscópicos tienen mayor probabilidad de ocurrir en el rango de energías del haz considerados, especialmente el efecto fotoeléctrico, debido a su dependencia funcional respecto de la energía y al número atómico ($\sigma_{\text{pe}} \sim Z^n/E^m$, $4 < n < 5$; $m = -3$), y a la diferencia en concentración de elementos de altos Z en los tejidos mamarios sanos y malignos, respectivamente. Este efecto es evidente, por ejemplo, en las imágenes mamográficas de tejidos mamarios con microcalcificaciones obtenidas con haces de radiaciones, cuyas energías están comprendidas en el intervalo $15 \text{ keV} \leq E \leq 55 \text{ keV}$; siendo un signo importante en la detección de cáncer, lo que hace que la mamografía sea una técnica precisa para la localización de lesiones. Es importante señalar que tanto el tejido mamario sano como los tejidos mamarios malignos son tejidos blandos, con muy poca diferencia de densidad o muy poco contraste, pero diferentes concentraciones de elementos de altos Z [16]. Las consideraciones precedentes indican la necesidad de utilizar haces de rayos X de bajas energías ($25 \text{ keV} \leq E \leq 30 \text{ keV}$) para optimizar las imágenes y la dosis absorbida.

En la Tabla 2 se muestran los valores calculados de los números atómicos efectivos parciales y totales, Z_{eff} , $Z_{\text{eff}}^{\text{pe}}$ y $Z_{\text{eff}}^{\text{C}}$ a 30 keV, para tejidos mamarios sanos y malignos. Los mismos muestran claramente que el mecanismo relevante es el efecto fotoeléctrico, siendo el determinante de la diferencia en el número atómico efectivo total.

Tabla 2. Números atómicos efectivos parciales y totales, calculados para la energía de 30 keV.

Mecanismo de Interacción	Numero Atómico Efectivo	
	Tejido Mamario Sano	Tejido Mamario Maligno
Dispersión Rayleigh	6,134	6,446
Efecto Fotoeléctrico	7,741	9,157
Dispersión Compton	2,948	2,948
Total	3,825	4,170

IV. CONCLUSIÓN

Los resultados obtenidos muestran que utilizando una combinación adecuada del conjunto de valores de

los parámetros que caracterizan un haz de fotones y tejidos mamarios sanos y malignos, energía del haz y diferencia de concentración de elementos de altos Z, respectivamente, haría posible, en principio, el uso de los números atómicos efectivos parciales correspondientes a los procesos microscópicos relevantes del proceso de interacción radiación – tejido, para describir y diferenciar los tejidos mamarios sanos y malignos.

AGRADECIMIENTO

Gracias al Prof. Dr. I. Gerward por tomar tiempo de su apretada agenda, para comentar sobre el manuscrito y proporcionar el software de WinXcom. Este trabajo fue parcialmente financiado por PI-07-2007 Secretaría Gral. de Ciencia y Técnica-Universidad Nacional del Nordeste. SPU-Programa Voluntariado 2007 y FaCENA - UNNE. El autor M.R. Valenzuela agradece al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) por la financiación.

REFERENCIAS

- [1]. Khan M.F. The physics of Radiation Therapy.4 Ed. Lippincott Williams & Wilkins, Philadelphia, 2010.
- [2]. Hine G.J. The effective atomic numbers of materials for various gamma interactions. *Physics Review*. 85, 725–737, 1952.
- [3]. K-H N.G., Bradley D.A., Looi L-M. Elevated trace element concentrations in malignant breast tissues. *The British Journal of Radiology*. 375-382,1997.
- [4]. Theodorakou C., Farquharson M.J. Human soft tissue analysis using x-ray or gamma-ray techniques. *Phys. Med. Biol.* 53, R111–R149, 2008.
- [5]. Koc N., Ozyol H.Z. Dependence of partial and total photon interactions in some biological samples. *Rad. Phys. And Chemistry*. 59, 339-345, 2000.
- [6]. Woodard H.Q., White D.R. The composition of body tissues. *Brit. J. Radiol.* 59, 1209-1219. 198 1986.
- [7]. Manohara S.R, Hanagodimath S.M., Gerward L. The effective atomic numbers of some biomolecules calculated by two methods: A comparative study. *Med. Phys*, 36, 2009.
- [8]. Taylor M.L., Smith R.L., Dossing F., Franich R.D. Robust calculation of effective atomic numbers: The Auto-Zeff software. *Med. Phys.* 39 (4), Abril 2012.
- [9]. Taylor M.L. Quantification of differences in the effective atomic numbers of healthy an cancerous tissues: A discussion in the context of diagnostic and dosimetry. *Med. Phys.* 39(9), 5437.
- [10]. Yang N.C., Lechner P.K., Hawkins W. G. Effective atomic number for low-energy total photon interactions in human tissues. *Med. Phys.* 14, 759–766, 1987.
- [11]. Gerward L., Guilbert N., Jensen K.B., Levring H. WinXCom – a program for calculating X-ray attenuation coefficients. *Radiat. Phys. Chem.* 71, 653–654. 2004.
- [12]. Gerward L., Guilbert N., Jensen K.B., Levrin H. X-ray absorption in matter. Reengineering XCOM. *Radiat. Phys. Chem*, 60, 23–24, 2001.
- [13]. Berger M.J., Hubbell J.H., Seltzer S.M., Chang J., Coursey J.S., Sukumar R., Zucker D.S., Olsen K. The National Institute of Standards and Technology (NIST) of the U.S. Department of Commerce. XCOM: Photon Cross Sections Database. 1990, 1998. Consultado el 16 de abril de 2012 en: <http://physics.nist.gov/xcom>.
- [14]. Johns P.C., Yaffe M.J. X-ray characterization of normal and neoplastic breast tissues. *Phys. Med. Biol.* 32, 675-695, 1987.
- [15]. Baldazzi G., Member P.L., Rossi S. Characterization of Biological Tissues using X-ray Attenuation Data. *IEEE Nuclear Sciences Symposium Conference, Record*. 4798-4802, 2008.
- [16]. Durham T., Snow E. Metal ions and carcinogenesis. *EXS*, 96, 97–139, 2006.