

TRABALHOS DE CONCLUSÃO DE CURSO

GATOS INSTÁVEIS

2026

TRABALHOS DE CONCLUSÃO DE CURSO

GATOS INSTÁVEIS

2026



ÍNDICE

ESTRUTURA INSTITUCIONAL

PREFÁCIO

GATOS INSTÁVEIS (2024)

Buracos negros de Schwarzschild

Arthur Queiroz Araujo

Orientador: Prof. Dr. Daniel Augusto Turolla Vanzella

Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo

Qubits e o teletransporte quântico

Cecília Cristina Cavalcanti dos Santos

Orientador: Prof. Dr. Gustavo Garcia Rigolin

Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos

Da evolução estelar à relatividade: a formação e a descrição dos buracos negros

Eduardo Henrique Fabiane e Rafael Araújo de Oliveira

Orientador: Prof. Dr. André Gustavo Scagliusi Landulfo

Universidade Federal do ABC

Novas fronteiras da radioterapia: FLASH-RT e análise de resultados em simulação Monte Carlo

Filipe Campos Ribeiro

Orientadora: Profa. Dra. Juliana Fernandes Pavoni

Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo

Nanopartículas de BaSO_4Tb para terapia fotodinâmica ativada por raios X: avaliação do potencial como nanocintiladores

Iara Paulone Gonçalves

Orientador: Prof. Dr. Éder José Guidelli

Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo

Memória de trabalho: uma análise através da óptica da neurociência computacional

Isabella Stimer Eberhardt

Orientador: Prof. Dr. Antonio Carlos Roque da Silva Filho

Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo

Novas fronteiras da radioterapia: radiogenômica e radiômica na predição de perfis moleculares em metástases cerebrais de câncer de mama

Larissa Ribeiro do Amaral

Orientadora: Profa. Dra. Juliana Fernandes Pavoni

Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo

Novas fronteiras da radioterapia: VMAT, Grid e Lattice em sarcomas de tecidos moles

Liabilih Angela Ribas Schoemberger

Orientadora: Profa. Dra. Juliana Fernandes Pavoni

Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo

Espectroscopia do harmônio em um modelo não relativístico

Manuella Oliveira Rodrigues

Orientadora: Profa. Dra. Patrícia Camargo Magalhães

Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas

É possível construir aviões utilizando cola e fibra de carbono?

Melissa Katerberg Zanatta

Orientador: Prof. Dr. Volnei Tita

Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo

Novas fronteiras da radioterapia: PET-Linac

Rafael Alcantara Cabrera

Orientadora: Profa. Dra. Juliana Fernandes Pavoni

Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo

ESTRUTURA INSTITUCIONAL

CONSELHO CURADOR

Klaus Werner Capelle (Presidente)
Samuel de Abreu Pessoa (Vice Presidente)
Alexandre Reily Rocha
Koichi Sameshima
Paula Raal
Renato Vicente
Roberto Dell'Aglio Dias da Costa
Roberto Slepetyts Ferreira
Rogério Rosenfeld

DIRETORIA EXECUTIVA

Gerson Francisco (Diretor Presidente)
José de Bortoli (Diretor Financeiro)
Norma Reggiani (Diretora Acadêmica)

CONSELHO FISCAL

Elizabeth Borelli (Presidente)
Fábio Rodrigues Oliveira
Marco César Gluckstern

CONSELHO CIENTÍFICO

Thyrso Villela Neto (Presidente)
Adilson Jesus Aparecido de Oliveira
Beatriz Leonor Silveira Barbuy
Débora Perez Menezes
Nathan Jacob Berkovits

ESCOLA DE TALENTOS

Ricardo D'Elia Matheus (Diretor)
Marcelo Moraes Guzzo (Presidente do Grupo de Patronos)
Carlos Henrique de Brito Cruz (Patrono)
Marcelo Knobel (Patrono)
Ricardo Magnus Osório Galvão (Patrono)
André Paschoal (Tutor)
Leonardo de Lima (Tutor)
Renata Ferrante Leoni (Tutora)
José Abdalla Helayël-Neto (Tutor)
Fabricio Marques do Carmo (Monitor)
Katiane Janke Krainski (Psicóloga)
Welington Barbosa de Souza (Secretário)

PREFÁCIO

Início este Prefácio do 5º volume de Trabalhos de Conclusão de Curso (TCC) da Escola de Talentos com enorme prazer. É muito animador presenciar o crescimento da Escola de Talentos, tanto em seu tamanho quanto na diversidade de áreas em que os trabalhos têm sido realizados. Temos este ano 12 alunos concluintes, a maior turma até o momento, com pesquisas em Radioterapia, Física de Partículas, Relatividade, Nanotecnologia aplicada à Medicina, Neurociência, Fundamentos de Mecânica Quântica e Engenharia Aeroespacial. Este é o resultado do trabalho conjunto de muitas pessoas animadas e competentes que eu tenho o privilégio e a alegria de coordenar. Cabem portanto muitos agradecimentos, que faço a seguir.

Agradeço primeiramente ao Prof. Dr. Marcelo Guzzo que faz o acompanhamento dos TCCs e preside o Grupo de Patronos da Escola de Talentos, responsável por indicar e convidar Orientadores para a realização dos TCCs. Agradeço também aos demais membros deste Grupo, os notáveis Prof. Dr. Carlos Henrique de Brito Cruz, Prof. Dr. Marcelo Knobel e Prof. Dr. Ricardo Magnus Osório Galvão.

Agradeço efusivamente aos orientadores destes TCCs, que com trabalho voluntário coroaram com brilho e competência o nosso projeto pedagógico: Profa. Dra. Juliana Fernandes Pavoni, Profa. Dra. Patrícia Camargo Magalhães, Prof. Dr. André Gustavo Scagliusi Landulfo, Prof. Dr. Daniel Augusto Turolla Vanzella, Prof. Dr. Éder José Guidelli, Prof. Dr. Antonio Carlos Roque da Silva Filho, Prof. Dr. Gustavo Garcia Rigolin e Prof. Dr. Volnei Tita.

Agradeço aos nossos incríveis tutores, que preparam nossos jovens talentos no primeiro ano do programa: Prof. Dr. André Paschoal, Prof. Dr. Leonardo de Lima, Profa. Dra. Renata Leoni, Prof. Dr. Jose Abdalla Helayel Neto e ao nosso monitor Prof. Dr. Fabricio Marques.

Agradeço a todos da equipe do Instituto Principia, em particular, o Prof. Dr. Gerson Francisco, Sr. José Bortoli, Prof. Dr. Klaus Capelle e Profa. Dra. Norma Reggiani; à nossa psicóloga, Me. Katiane Krainsky; e ao nosso secretário Welington Barbosa de Souza.

E, por último, mas com grande destaque, agradeço aos alunos da turma *Gatos Instáveis*, que se desdobraram com entusiasmo na elaboração destes tão caprichados

TCCs: Filipe Campos Ribeiro, Larissa Ribeiro do Amaral, Liabilih Angela Ribas Schoemberger, Rafael Alcantara Cabrera, Manuella Oliveira Rodrigues, Eduardo Henrique Fabiane, Rafael Araújo de Oliveira, Arthur Queiroz Araujo, Iara Paulone Gonçalves, Isabella Stimer Eberhardt, Cecília Cristina Cavalcanti dos Santos e Melissa Katerberg Zanatta.

Que a Escola de Talentos continue prosperando!

*Ricardo D'Elia Matheus
Professor do Instituto de Física Teórica – UNESP
Diretor da Escola de Talentos*

São Paulo, 16 de julho de 2026



GATOS INSTÁVEIS

Buracos negros de Schwarzschild

Arthur Queiroz Araujo

Orientador: Prof. Dr. Daniel Augusto Turolla Vanzella
Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo

2026

Buracos negros de Schwarzschild

A Solução de Schwarzschild: Geometria, Interior Estelar, Simetrias e Movimento de Partículas e Luz

Tópicos abordados:

Solução de Schwarzschild (métrica estática e esfericamente simétrica)

· Solução de Schwarzschild interior

Campos de Killing, quantidades conservadas e constantes de movimento

Solução de Schwarzschild exterior — geodésicas tipo-tempo e tipo-luz

Disciplina: Relatividade Geral

Fortaleza, Ceará — 12 de julho de 2026

Conteúdo

Resumo	2
Introdução	3
1 Desenvolvimento	4
1.1 Solução de Schwarzschild: métrica estática e esfericamente simétrica	4
1.1.1 O ansatz estático e esfericamente simétrico	4
1.1.2 Métrica de Schwarzschild exterior e o teorema de Birkhoff	4
1.2 Solução de Schwarzschild interior	6
1.2.1 Fluido perfeito e as equações de Tolman–Oppenheimer–Volkoff . . .	7
1.2.2 Solução para densidade uniforme	7
1.2.3 O limite de Buchdahl	8
1.3 Campos de Killing, quantidades conservadas e constantes de movimento . .	8
1.3.1 Definição e equação de Killing	9
1.3.2 Os campos de Killing da métrica de Schwarzschild	9
1.3.3 Quantidades conservadas ao longo de geodésicas	9
1.4 Solução de Schwarzschild exterior: geodésicas tipo-tempo	10
1.4.1 Redução ao problema radial	10
1.4.2 O potencial efetivo	11
1.4.3 Órbitas circulares e a última órbita circular estável (ISCO)	11
1.4.4 Órbitas ligadas e a precessão do periélio	11
1.5 Solução de Schwarzschild exterior: geodésicas tipo-luz	12
1.5.1 Redução ao problema radial e o parâmetro de impacto	12
1.5.2 A esfera de fótons	13
1.5.3 Captura, espalhamento e o parâmetro de impacto crítico	13
1.5.4 Deflexão gravitacional da luz	13
2 Conclusão	15
Referências	16
Apêndice A — Revisão de Conceitos Básicos de Geometria Diferencial	17
A.1 Métrica e elemento de linha	17
A.2 Símbolos de Christoffel e derivada covariante	17
A.3 Geodésicas	17
A.4 Curvatura: tensores de Riemann, Ricci e escalar	18
A.5 Campos de Killing	18
A.6 Equações de campo de Einstein	18

Resumo

Este relatório apresenta uma revisão técnica da solução de Schwarzschild, o resultado mais fundamental da Relatividade Geral para a descrição de corpos esféricos estáticos e, no limite de compactação extrema, de buracos negros. Parte-se da imposição de simetria estática e esfericamente simétrica ao tensor métrico e da resolução das equações de campo de Einstein no vácuo, obtendo-se a métrica exterior de Schwarzschild e discutindo-se o teorema de Birkhoff e o significado físico do raio de Schwarzschild. Em seguida, deriva-se a solução interior para uma estrela idealizada de densidade de energia uniforme, a partir da equação de Tolman–Oppenheimer–Volkoff, culminando no limite de Buchdahl, que estabelece a compacidade máxima permitida a qualquer estrela estática e aponta, em bases puramente geométricas, para a inevitabilidade do colapso gravitacional. As simetrias do espaço-tempo resultante são então formalizadas por meio dos campos de Killing, dos quais decorrem as quantidades conservadas — energia e momento angular específicos — que permitem reduzir o movimento geodésico a um problema unidimensional efetivo. Esse formalismo é aplicado ao estudo completo das geodésicas tipo-tempo, incluindo órbitas circulares, a última órbita estável (ISCO) e a precessão do periélio, e das geodésicas tipo-luz, incluindo a esfera de fótons, o parâmetro de impacto crítico e a deflexão gravitacional da luz. Ao final, discute-se como esses resultados, já contidos na solução de Schwarzschild de 1916, permanecem centrais para a física contemporânea de buracos negros, sustentando desde os testes clássicos da Relatividade Geral até a interpretação das imagens de sombras de buracos negros obtidas pelo Event Horizon Telescope.

Palavras-chave: Relatividade Geral; Solução de Schwarzschild; Buracos Negros; Campos de Killing; Geodésicas.

Introdução

A Relatividade Geral (RG), formulada por Einstein em 1915, descreve a gravitação não como uma força que atua à distância, mas como uma manifestação da curvatura do espaço-tempo, causada pela presença de energia e momento. O conteúdo dinâmico da teoria está condensado nas *equações de campo de Einstein*,

$$G_{\mu\nu} + \Lambda g_{\mu\nu} = \frac{8\pi G}{c^4} T_{\mu\nu}, \quad (1)$$

em que $G_{\mu\nu}$ é o tensor de Einstein, construído a partir da curvatura do espaço-tempo, $T_{\mu\nu}$ é o tensor energia-momento da matéria e dos campos presentes, G é a constante gravitacional de Newton, c a velocidade da luz e Λ a constante cosmológica (que, para os problemas tratados aqui, será tomada igual a zero, por ser irrelevante em escalas estelares). Trata-se de um sistema de dez equações diferenciais parciais, não lineares e acopladas para as componentes do tensor métrico $g_{\mu\nu}$. Encontrar soluções exatas é, em geral, extremamente difícil — a não ser que se imponham simetrias que simplifiquem drasticamente o problema.

A simetria mais natural para descrever o campo gravitacional de uma estrela isolada e não rotacionante é a simetria esférica estática. Sob essa hipótese, Karl Schwarzschild obteve, ainda em 1916, duas soluções complementares:

- a *solução exterior*, válida no vácuo fora da matéria que gera o campo, relevante para o espaço-tempo ao redor de estrelas, planetas e buracos negros;
- a *solução interior*, válida dentro de uma estrela idealizada como um fluido perfeito de densidade de energia, que se conecta suavemente à solução exterior na superfície da estrela.

Compreender essas duas soluções exige, além de resolver as equações de campo, entender as simetrias do espaço-tempo resultante — formalizadas pelos *campos de Killing* — e como elas se traduzem em leis de conservação ao longo do movimento de partículas e de luz. Esse é o fio condutor deste relatório: da geometria à dinâmica, das equações de campo às trajetórias observáveis.

O texto está organizado da seguinte forma: a seção de Desenvolvimento é dividida em cinco partes, correspondentes aos tópicos solicitados — (i) a construção da métrica estática e esfericamente simétrica e a solução exterior no vácuo; (ii) a solução interior de Schwarzschild para uma estrela de densidade uniforme; (iii) os campos de Killing do espaço-tempo de Schwarzschild e as quantidades conservadas associadas; (iv) a análise das geodésicas tipo-tempo, que descrevem o movimento de partículas massivas; e (v) a análise das geodésicas tipo-luz (nulas), que descrevem a trajetória de fótons. A Conclusão sintetiza os resultados e suas implicações físicas, e o Apêndice revisa os conceitos matemáticos básicos de geometria diferencial utilizados ao longo do relatório.

1 Desenvolvimento

1.1 Solução de Schwarzschild: métrica estática e esfericamente simétrica

O primeiro passo para resolver as equações de Einstein no contexto de um corpo esférico e estático é escrever a forma mais geral possível da métrica compatível com essas simetrias, e só então impor as equações de campo para fixar as funções livres que nela aparecem.

1.1.1 O *ansatz* estático e esfericamente simétrico

Um espaço-tempo é dito *estático* quando admite um campo de Killing tipo-tempo ortogonal a uma família de hipersuperfícies (não há termos cruzados $dt dr$, $dt d\theta$ ou $dt d\varphi$, e nenhuma componente da métrica depende de t), e *esfericamente simétrico* quando admite o grupo de isometrias $SO(3)$ atuando nas hipersferas $r = \text{constante}$. Sob essas duas hipóteses, o elemento de linha mais geral pode sempre ser escrito, em coordenadas (t, r, θ, φ) , na forma

$$ds^2 = -e^{2\Phi(r)} c^2 dt^2 + e^{2\Lambda(r)} dr^2 + r^2 (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2), \quad (2)$$

em que $\Phi(r)$ e $\Lambda(r)$ são duas funções a determinar, e o termo $r^2(d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2)$ é a métrica usual da esfera de raio r , que garante que a área de cada esfera $r = \text{constante}$ seja $4\pi r^2$ — a definição do chamado *raio de área* (ou raio-curvatura), coordenada radial usada nesse sistema.

1.1.2 Métrica de Schwarzschild exterior e o teorema de Birkhoff

Fora da matéria que produz o campo gravitacional, o tensor energia-momento se anula, $T_{\mu\nu} = 0$, e as equações de Einstein (com $\Lambda_c = 0$) reduzem-se à condição de vácuo

$$R_{\mu\nu} = 0. \quad (3)$$

Christoffel e Ricci para o *ansatz* estático e esfericamente simétrico Para a métrica

$$ds^2 = -e^{2\Phi(r)} c^2 dt^2 + e^{2\Lambda(r)} dr^2 + r^2 d\Omega^{21}. \quad (4)$$

¹Aqui $d\Omega^2 \equiv d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2$ denota o elemento de ângulo sólido da esfera unitária, com $0 \leq \theta \leq \pi$ e $0 \leq \varphi < 2\pi$.

calculando os símbolos de Christoffel não nulos (ver Apêndice A) e, a partir deles, as componentes do tensor de Ricci, obtém-se

$$R_{tt} = e^{2\Phi-2\Lambda} \left[\Phi'' + \Phi'^2 - \Phi'\Lambda' + \frac{2\Phi'}{r} \right], \quad (5)$$

$$R_{rr} = -\Phi'' - \Phi'^2 + \Phi'\Lambda' + \frac{2\Lambda'}{r}, \quad (6)$$

$$R_{\theta\theta} = e^{-2\Lambda} [1 + r(\Phi' - \Lambda')] - 1, \quad R_{\phi\phi} = \sin^2 \theta R_{\theta\theta}. \quad (7)$$

Essas expressões são puramente geométricas — resultado do cálculo de curvatura — e ainda *não* usam a condição de vácuo.

Primeira equação: a combinação $R_{tt}/e^{2\Phi} + R_{rr}/e^{2\Lambda}$ Antes de impor qualquer condição, monte essa combinação específica:

$$\frac{R_{tt}}{e^{2\Phi}} + \frac{R_{rr}}{e^{2\Lambda}} = e^{-2\Lambda} \left[\Phi'' + \Phi'^2 - \Phi'\Lambda' + \frac{2\Phi'}{r} \right] + e^{-2\Lambda} \left[-\Phi'' - \Phi'^2 + \Phi'\Lambda' + \frac{2\Lambda'}{r} \right]. \quad (8)$$

Os termos Φ'' , Φ'^2 e $\Phi'\Lambda'$ se cancelam identicamente — isso vale para quaisquer funções $\Phi(r)$, $\Lambda(r)$, sendo pura álgebra. Sobra

$$\frac{R_{tt}}{e^{2\Phi}} + \frac{R_{rr}}{e^{2\Lambda}} = \frac{2}{r} e^{-2\Lambda} (\Phi' + \Lambda'). \quad (9)$$

Agora impomos o vácuo, $R_{tt} = 0$ e $R_{rr} = 0$ separadamente. O lado esquerdo se anula e, como $e^{-2\Lambda} \neq 0$ e $r \neq 0$,

$$\Phi'(r) + \Lambda'(r) = 0 \implies \Phi(r) + \Lambda(r) = \text{constante}. \quad (10)$$

Exigindo que a métrica se torne assintoticamente plana ($\Phi, \Lambda \rightarrow 0$ quando $r \rightarrow \infty$), a constante deve ser nula, de modo que

$$\Lambda(r) = -\Phi(r), \quad \text{isto é,} \quad g_{tt} g_{rr} = -1. \quad (11)$$

Segunda equação: $R_{\theta\theta} = 0$ Com $\Lambda = -\Phi$, temos $\Phi' - \Lambda' = 2\Phi'$, de modo que

$$R_{\theta\theta} = 0 \implies e^{2\Phi} [1 + 2r\Phi'] = 1. \quad (12)$$

Observando que $e^{2\Phi}(1 + 2r\Phi') = \frac{d}{dr} [r e^{2\Phi}]$, a equação se reduz a

$$\frac{d}{dr} (r e^{2\Phi}) = 1 \implies r e^{2\Phi} = r - \frac{2GM}{c^2}, \quad (13)$$

onde a constante de integração já foi escrita como $-2GM/c^2$, por conveniência. Logo,

$$e^{2\Phi(r)} = 1 - \frac{2GM}{c^2 r}. \quad (14)$$

Identificação da constante No limite de campos fracos e velocidades não relativísticas, a equação de geodésica temporal se reduz a $\ddot{x} = -\nabla\Phi_N$, com $g_{tt} \approx -(1 + 2\Phi_N/c^2)$. Comparando,

$$1 - \frac{2GM}{c^2 r} \approx 1 + \frac{2\Phi_N(r)}{c^2} \implies \Phi_N(r) = -\frac{GM}{r}, \quad (15)$$

que é exatamente o potencial newtoniano de uma massa pontual M . A constante M é identificada com a massa total do corpo central, medida por um observador distante através da atração gravitacional que ele produz (massa de Schwarzschild, ou massa ADM/Komar neste caso estático).

Resultado final (métrica de Schwarzschild)

$$ds^2 = -\left(1 - \frac{2GM}{c^2 r}\right) c^2 dt^2 + \left(1 - \frac{2GM}{c^2 r}\right)^{-1} dr^2 + r^2 d\Omega^2. \quad (16)$$

Ou simplismente,

$$ds^2 = -\left(1 - \frac{r_s}{r}\right) c^2 dt^2 + \frac{dr^2}{1 - r_s/r} + r^2 (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2) \quad (17)$$

com o *raio de Schwarzschild* definido por

$$r_s \equiv \frac{2GM}{c^2}. \quad (18)$$

Essa métrica é válida em todo o espaço vazio ao redor de qualquer distribuição de massa M com simetria esférica, independentemente de a fonte ser estática, pulsante ou em colapso — resultado conhecido como *teorema de Birkhoff*: a solução de vácuo esfericamente simétrica das equações de Einstein é necessariamente estática (e é exatamente a métrica de Schwarzschild) na região exterior à matéria. Isso é um forte análogo relativístico do teorema de Newton sobre o campo gravitacional externo de distribuições de massa esfericamente simétricas.

Para $r = r_s$, as componentes g_{tt} e g_{rr} tornam-se singulares nesse sistema de coordenadas; trata-se, porém, de uma *singularidade de coordenadas* (removível por uma mudança apropriada de coordenadas, como as de Eddington–Finkelstein ou Kruskal–Szekeres), e não de uma singularidade física — o escalar de curvatura de Kretschmann, $R_{\mu\nu\rho\sigma}R^{\mu\nu\rho\sigma} \propto M^2/r^6$, permanece finito em $r = r_s$, só divergindo genuinamente em $r = 0$. Para o Sol, $r_s \approx 2,95$ km, muito menor que o raio solar; assim, a região $r \leq r_s$ nunca é atingida no vácuo exterior de estrelas ordinárias, sendo relevante apenas para objetos extremamente compactos — os buracos negros.

1.2 Solução de Schwarzschild interior

A métrica exterior descreve o vácuo fora da estrela, mas nada diz sobre a geometria em seu interior, onde $T_{\mu\nu} \neq 0$. Para obter a solução interior, Schwarzschild considerou o

modelo mais simples possível de fonte: um *fluido perfeito estático de densidade de energia constante*, $\rho(r) = \rho_0$ para $0 \leq r \leq R$, onde R é o raio da estrela — uma idealização razoável para estrelas de baixa compressibilidade, ainda que fisicamente irrealista para estrelas reais (nas quais a densidade cresce em direção ao centro).

1.2.1 Fluido perfeito e as equações de Tolman–Oppenheimer–Volkoff

Para um fluido perfeito em equilíbrio hidrostático, o tensor energia-momento é $T_{\mu\nu} = (\rho + P/c^2) u_\mu u_\nu + P g_{\mu\nu}$, em que $\rho(r)$ é a densidade de energia, $P(r)$ a pressão e u^μ a quadrivelocidade do fluido. Definindo a *função massa*

$$m(r) \equiv 4\pi \int_0^r \rho(r') r'^2 dr', \quad (19)$$

as equações de Einstein aplicadas ao ansatz estático e esfericamente simétrico da Seção 1.1, agora com fonte material, fornecem $e^{2\Lambda(r)} = [1 - 2Gm(r)/(c^2 r)]^{-1}$, e a condição de equilíbrio hidrostático entre pressão e gravidade toma a forma da célebre *equação de Tolman–Oppenheimer–Volkoff (TOV)*:

$$\frac{dP}{dr} = - \frac{G(\rho + P/c^2)(m(r) + 4\pi r^3 P/c^2)}{r^2 (1 - 2Gm(r)/(c^2 r))}. \quad (20)$$

Essa equação é a generalização relativística da equação newtoniana de equilíbrio hidrostático, $dP/dr = -Gm(r)\rho/r^2$, da qual se recupera no limite $P \ll \rho c^2$ e $2Gm/(c^2 r) \ll 1$. Ela mostra que, na RG, tanto a pressão quanto o próprio volume (via o fator $4\pi r^3 P/c^2$) contribuem para o *peso* gravitacional do fluido — uma diferença qualitativa importante em relação à gravitação newtoniana, responsável, por exemplo, pela existência de uma massa máxima para estrelas de nêutrons.

1.2.2 Solução para densidade uniforme

Para $\rho(r) = \rho_0$ constante, a função massa é simplesmente $m(r) = \frac{4}{3}\pi\rho_0 r^3$, de modo que, na superfície $r = R$, $m(R) = M = \frac{4}{3}\pi\rho_0 R^3$ coincide com a massa que aparece na métrica exterior — garantindo a continuidade de $e^{2\Lambda}$ em $r = R$. É conveniente reintroduzir o raio de Schwarzschild $r_s = 2GM/c^2$. Integrando a equação TOV com essa densidade constante, e impondo que a pressão se anule na superfície, $P(R) = 0$ (condição de contorno que define a fronteira da estrela), obtêm-se as duas funções métricas interiores:

$$e^{2\Lambda(r)} = \frac{1}{1 - r_s r^2/R^3}, \quad (21)$$

$$e^{\Phi(r)} = \frac{3}{2} \sqrt{1 - \frac{r_s}{R}} - \frac{1}{2} \sqrt{1 - \frac{r_s r^2}{R^3}}, \quad (22)$$

de modo que o elemento de linha completo no interior ($0 \leq r \leq R$) é

$$ds^2 = - \left[\frac{3}{2} \sqrt{1 - \frac{r_s}{R}} - \frac{1}{2} \sqrt{1 - \frac{r_s r^2}{R^3}} \right]^2 c^2 dt^2 + \frac{dr^2}{1 - r_s r^2/R^3} + r^2 (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2), \quad (23)$$

e o campo de pressão correspondente é

$$P(r) = \rho_0 c^2 \frac{\sqrt{1 - r_s r^2 / R^3} - \sqrt{1 - r_s / R}}{3\sqrt{1 - r_s / R} - \sqrt{1 - r_s r^2 / R^3}}. \quad (24)$$

Pode-se verificar diretamente que $P(R) = 0$, como exigido, e que a pressão cresce monotonicamente em direção ao centro, atingindo seu valor máximo em $r = 0$:

$$P_c \equiv P(0) = \rho_0 c^2 \frac{1 - \sqrt{1 - r_s / R}}{3\sqrt{1 - r_s / R} - 1}. \quad (25)$$

1.2.3 O limite de Buchdahl

A expressão para a pressão central revela algo notável: o denominador $3\sqrt{1 - r_s / R} - 1$ anula-se quando

$$\frac{r_s}{R} = \frac{8}{9} \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{M}{R} = \frac{4c^2}{9G}. \quad (26)$$

Para qualquer compacidade r_s / R que se aproxime desse valor, a pressão central diverge, $P_c \rightarrow \infty$; para $r_s / R > 8/9$, não existe solução estática regular — nenhuma pressão, por maior que seja, consegue sustentar o fluido contra o colapso gravitacional. Esse resultado, conhecido como *limite (ou teorema) de Buchdahl*, é mais geral do que a solução de densidade uniforme aqui obtida: Buchdahl demonstrou, em 1959, que *nenhuma* estrela estática, esfericamente simétrica, feita de um fluido com densidade não crescente para fora, pode ter compacidade $2GM/(c^2 R)$ maior que $8/9$. É um dos primeiros resultados rigorosos da RG a apontar, de forma quantitativa, para a inevitabilidade do colapso gravitacional em objetos suficientemente compactos, antecipando fisicamente a existência de buracos negros mesmo antes de qualquer discussão detalhada sobre horizontes de eventos.

Vale notar que o limite de Buchdahl ($2GM/(c^2 R) < 8/9$) é distinto — e mais restritivo — do que a simples exigência de que a estrela seja maior que seu próprio raio de Schwarzschild ($R > r_s$): há uma faixa $8/9 < r_s / R < 1$ em que a estrela ainda está fora de seu horizonte, mas já não pode existir em equilíbrio hidrostático estável.

1.3 Campos de Killing, quantidades conservadas e constantes de movimento

As simetrias impostas na Seção 1.1 — estaticidade e simetria esférica — não são apenas um artifício técnico para simplificar a busca da solução; elas correspondem a *isometrias* genuínas do espaço-tempo, geradas por *campos vetoriais de Killing*. Esses campos desempenham, na RG, o papel que translações e rotações desempenham na mecânica newtoniana: cada simetria contínua do espaço-tempo produz, pelo teorema de Noether, uma quantidade conservada ao longo do movimento de partículas livres.

1.3.1 Definição e equação de Killing

Um campo vetorial ξ é dito de Killing se o fluxo que ele preserva a métrica, isto é, se a derivada de Lie da métrica ao longo de ξ se anula: $\mathcal{L}_\xi g_{\mu\nu} = 0$. Em termos da derivada covariante, essa condição equivale à *equação de Killing*:

$$\nabla_\mu \xi_\nu + \nabla_\nu \xi_\mu = 0, \quad (27)$$

isto é, a parte simétrica de $\nabla_\mu \xi_\nu$ deve se anular. Geometricamente, isso significa que deslocar cada ponto do espaço-tempo ao longo de ξ por um parâmetro infinitesimal não altera as distâncias — ξ gera uma isometria.

1.3.2 Os campos de Killing da métrica de Schwarzschild

A métrica de Schwarzschild, exterior ou interior, admite exatamente quatro campos de Killing independentes, refletindo as simetrias impostas na sua construção:

- $\xi_{(t)} = \partial_t$ — gerador da estaticidade (translação temporal), único a menos de normalização, refletindo que nenhuma componente da métrica depende de t ;
- $\xi_{(\varphi)} = \partial_\varphi$ — gerador de rotações em torno do eixo z ;
- mais dois geradores independentes de rotação em torno dos outros dois eixos cartesianos, que, junto com $\xi_{(\varphi)}$, fecham a álgebra $\mathfrak{so}(3)$ do grupo de rotações.

O grupo de isometrias do espaço-tempo de Schwarzschild é, portanto, $\mathbb{R} \times SO(3)$: a estrutura $\mathbb{R}$ da translação temporal (estaticidade) multiplicada pelo grupo de rotações espaciais $SO(3)$ (simetria esférica). O gerador $\xi_{(t)}$ é tipo-tempo na região exterior ao horizonte ($r > r_s$), tornando-se nulo exatamente em $r = r_s$ e tipo-espaço dentro dele — fato que fundamenta a impossibilidade de um observador permanecer estático dentro do horizonte.

1.3.3 Quantidades conservadas ao longo de geodésicas

A relevância física dos campos de Killing para o movimento de partículas livres decorre do seguinte resultado geral: se ξ^μ é um campo de Killing e $x^\mu(\tau)$ é uma geodésica com quadrivelocidade $u^\mu = dx^\mu/d\tau$, então a quantidade escalar

$$C_\xi \equiv \xi_\mu u^\mu \quad (28)$$

é constante ao longo da geodésica, $dC_\xi/d\tau = 0$. A demonstração é direta a partir da equação geodésica $u^\nu \nabla_\nu u^\mu = 0$ combinada com a equação de Killing: o termo simétrico em $(\mu\nu)$ que surgiria de $\nabla_\nu \xi_\mu$ é cancelado, pois $u^\mu u^\nu$ é simétrico enquanto $\nabla_{(\mu} \xi_{\nu)} = 0$.

Aplicando esse resultado aos dois geradores relevantes para o movimento no plano orbital ($\theta = \pi/2$, sem perda de generalidade, dada a simetria esférica), obtêm-se as duas constantes de movimento fundamentais da dinâmica em Schwarzschild:

Energia específica (por unidade de massa de repouso, associada a $\xi_{(t)}$):

$$e \equiv -\frac{\xi_{(t)} \cdot u}{c^2} = \left(1 - \frac{r_s}{r}\right) c^2 \frac{dt}{d\tau}. \quad (29)$$

Momento angular específico (associado a $\xi_{(\varphi)}$):

$$\ell \equiv \xi_{(\varphi)} \cdot u = r^2 \frac{d\varphi}{d\tau}. \quad (30)$$

A conservação de ℓ é exatamente o análogo relativístico da conservação newtoniana do momento angular em um campo central e, como no caso newtoniano, implica que o movimento é *planar* — a trajetória permanece inteiramente no plano $\theta = \pi/2$ escolhido inicialmente, uma consequência direta da simetria esférica. A conservação de e é o análogo relativístico da conservação de energia mecânica por unidade de massa; a diferença essencial em relação ao caso newtoniano é o fator $(1 - r_s/r)$, que codifica o redshift gravitacional do tempo próprio do observador em queda em relação ao tempo coordenado t (tempo próprio de um observador estático no infinito).

Essas duas quantidades — e e ℓ , junto com a condição de normalização da quadri-velocidade (ou do vetor tangente, no caso de geodésicas nulas) — são exatamente o que permite reduzir o problema geodésico geral, de quatro equações diferenciais acopladas de segunda ordem, a uma única equação de primeira ordem para $r(\tau)$ (ou $r(\lambda)$), como será explorado nas Seções 1.4 e 1.5.

1.4 Solução de Schwarzschild exterior: geodésicas tipo-tempo

Partículas massivas em queda livre — planetas, sondas espaciais, qualquer corpo sujeito apenas à gravidade — seguem geodésicas tipo-tempo do espaço-tempo de Schwarzschild exterior. Usando as constantes de movimento e a normalização da quadri-velocidade, é possível reduzir o problema a uma equação unidimensional formalmente idêntica à de uma partícula em um potencial efetivo newtoniano.

1.4.1 Redução ao problema radial

Para uma geodésica tipo-tempo, a quadri-velocidade satisfaz a normalização $g_{\mu\nu}u^\mu u^\nu = -c^2$. Restringindo o movimento ao plano equatorial $\theta = \pi/2$ ($d\theta/d\tau = 0$, sempre possível pela simetria esférica) e usando as constantes e e ℓ definidas na Seção 1.3 para eliminar $dt/d\tau$ e $d\varphi/d\tau$, a normalização torna-se, após multiplicação por $(1 - r_s/r)$:

$$\left(\frac{dr}{d\tau}\right)^2 = e^2 - c^2 \left(1 - \frac{r_s}{r}\right) \left(1 + \frac{\ell^2}{c^2 r^2}\right). \quad (31)$$

Essa é uma equação de primeira ordem exclusivamente em $r(\tau)$ — o problema de dois corpos relativístico foi reduzido, tal como no caso newtoniano, a um problema radial unidimensional efetivo.

1.4.2 O potencial efetivo

Reescrevendo a equação anterior na forma familiar de conservação de energia, $(dr/d\tau)^2/2 + V_{\text{eff}}(r) = (e^2 - c^4)/(2c^2)$ (constante), identifica-se o *potencial efetivo*:

$$V_{\text{eff}}(r) = -\frac{GM}{r} + \frac{\ell^2}{2r^2} - \frac{GM\ell^2}{c^2 r^3}. \quad (32)$$

Os dois primeiros termos são exatamente o potencial efetivo newtoniano (gravitacional mais centrífugo); o terceiro termo, $\propto 1/r^3$, é uma correção puramente relativística, ausente na mecânica newtoniana. É esse termo que é responsável por toda a fenomenologia qualitativamente nova do movimento em Schwarzschild:

- para ℓ pequeno o suficiente, o termo $-GM\ell^2/(c^2 r^3)$ domina em pequenas distâncias e faz $V_{\text{eff}} \rightarrow -\infty$ quando $r \rightarrow 0$, eliminando a barreira centrífuga que, na física newtoniana, sempre impede a queda até $r = 0$; isso permite a captura direta de partículas com momento angular abaixo de um valor crítico;
- órbitas circulares, definidas por $dV_{\text{eff}}/dr = 0$, existem apenas para $\ell^2 \geq 12(GM/c)^2$, e apenas uma fração delas é estável.

1.4.3 Órbitas circulares e a última órbita circular estável (ISCO)

Impondo simultaneamente $dV_{\text{eff}}/dr = 0$ (órbita circular) e $d^2V_{\text{eff}}/dr^2 = 0$ (limiar de estabilidade), encontra-se o raio da *última órbita circular estável* (ISCO, do inglês *innermost stable circular orbit*):

$$r_{\text{ISCO}} = \frac{6GM}{c^2} = 3r_s. \quad (33)$$

Para $r < r_{\text{ISCO}}$ (mas ainda $r > 3GM/c^2$, o raio da órbita fóton circular limite para partículas ultrarrelativísticas, discutido na Seção 1.5), órbitas circulares ainda existem, mas são instáveis: qualquer perturbação radial infinitesimal leva a partícula a espiralar para dentro do horizonte ou a escapar para o infinito. Esse resultado é de importância astrofísica central: em discos de acreção ao redor de buracos negros e estrelas compactas, a matéria orbita de forma aproximadamente circular e estável apenas até r_{ISCO} , região interna à qual cai rapidamente em direção ao horizonte — definindo a borda interna observável do disco e sendo usado para estimar spins e massas de buracos negros a partir de espectros de raios X.

1.4.4 Órbitas ligadas e a precessão do periélio

Para energias $e < c^2$ (movimento ligado, análogo às órbitas elípticas newtonianas), a partícula oscila entre um raio mínimo (periélio) e um raio máximo (afélio) do potencial efetivo. Diferentemente do caso newtoniano — em que órbitas ligadas em um potencial $1/r$ são elipses fechadas, um resultado especial associado à simetria extra do problema de Kepler —, na RG o termo adicional $-GM\ell^2/(c^2 r^3)$ quebra essa degenerescência, e a

órbita deixa de se fechar: o periélio *precessiona* a cada revolução. Para órbitas quase circulares de semieixo maior a e excentricidade ε pequena, a precessão por órbita é dada, em primeira ordem em r_s/a , por

$$\Delta\varphi \approx \frac{6\pi GM}{c^2 a (1 - \varepsilon^2)}. \quad (34)$$

Para Mercúrio, essa fórmula prevê uma precessão de aproximadamente 43 segundos de arco por século (após descontar as perturbações newtonianas dos demais planetas) — valor que permaneceu inexplicado pela mecânica celeste newtoniana durante décadas e que foi um dos primeiros testes observacionais bem-sucedidos da Relatividade Geral, já em 1915.

1.5 Solução de Schwarzschild exterior: geodésicas tipo-luz

Fótons — e, em geral, qualquer partícula sem massa — seguem geodésicas nulas, caracterizadas por vetor tangente $k^\mu = dx^\mu/d\lambda$ (λ um parâmetro afim, não o tempo próprio, que se anula identicamente ao longo dessas trajetórias) satisfazendo $g_{\mu\nu}k^\mu k^\nu = 0$. O procedimento é inteiramente análogo ao da Seção 1.4, com as mesmas constantes de movimento $E = -\xi_{(t)} \cdot k$ e $L = \xi_{(\varphi)} \cdot k$ associadas aos mesmos campos de Killing — a diferença está apenas na condição de normalização.

1.5.1 Redução ao problema radial e o parâmetro de impacto

Impondo $g_{\mu\nu}k^\mu k^\nu = 0$ no plano equatorial,

$$-\left(1 - \frac{r_s}{r}\right)\dot{t}^2 + \left(1 - \frac{r_s}{r}\right)^{-1}\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2 = 0, \quad (35)$$

e eliminando $\dot{t} = dt/d\lambda$ e $\dot{\varphi} = d\varphi/d\lambda$ em favor de E e L através de

$$\dot{t} = \frac{E}{1 - r_s/r}, \quad \dot{\varphi} = \frac{L}{r^2}, \quad (36)$$

obtem-se, após multiplicar por $(1 - r_s/r)$,

$$\left(\frac{dr}{d\lambda}\right)^2 = E^2 - \left(1 - \frac{r_s}{r}\right)\frac{L^2}{r^2}. \quad (37)$$

Como apenas a razão entre E e L tem significado geométrico (a normalização de k^μ é arbitrária, ao contrário do caso massivo), define-se o *parâmetro de impacto* $b \equiv L/E$. Dividindo a equação radial por E^2 e usando $L^2/E^2 = b^2$, a equação se reescreve como

$$\frac{1}{E^2} \left(\frac{dr}{d\lambda}\right)^2 = 1 - \frac{b^2}{r^2} \left(1 - \frac{r_s}{r}\right), \quad (38)$$

de onde se identifica o *potencial efetivo para fótons*:

$$V_{\text{eff}}^\gamma(r) = \frac{L^2}{r^2} \left(1 - \frac{r_s}{r}\right), \quad (39)$$

de modo que a equação radial toma a forma compacta e familiar

$$\left(\frac{dr}{d\lambda}\right)^2 = E^2 - V_{\text{eff}}^\gamma(r). \quad (40)$$

Note a ausência de qualquer termo puramente atrativo tipo $-1/r$ (o análogo do termo gravitacional newtoniano some, pois fótons não possuem massa de repouso); toda a estrutura do potencial vem do acoplamento entre o termo centrífugo L^2/r^2 e o fator de curvatura $(1 - r_s/r)$.

1.5.2 A esfera de fótons

O potencial $V_{\text{eff}}^\gamma(r)$ tem um único ponto extremo, um máximo, localizado em

$$r_{\text{ph}} = \frac{3GM}{c^2} = \frac{3}{2} r_s. \quad (41)$$

Nesse raio existe uma órbita circular de fótons — a *esfera de fótons* — porém instável: qualquer perturbação radial faz o fóton espiralar para o horizonte ou escapar para o infinito, exatamente como esperado de um máximo (e não mínimo) de potencial efetivo. Vale notar a hierarquia $r_s < r_{\text{ph}} < r_{\text{ISCO}} = 3r_s$: o horizonte de eventos, a esfera de fótons e a última órbita estável de partículas massivas ocorrem em três raios distintos, na ordem crescente esperada — fótons, sendo ultrarrelativísticos, conseguem orbitar estavelmente mais próximo do buraco negro do que qualquer partícula massiva, mas ainda assim não podem fazê-lo de forma estável.

1.5.3 Captura, espalhamento e o parâmetro de impacto crítico

O valor de V_{eff}^γ no máximo, avaliado em r_{ph} , define o *parâmetro de impacto crítico*:

$$b_c = \frac{3\sqrt{3}GM}{c^2} = \frac{3\sqrt{3}}{2} r_s. \quad (42)$$

Fótons vindos do infinito com $b < b_c$ ultrapassam a barreira de potencial e são inevitavelmente capturados pelo buraco negro; fótons com $b > b_c$ são espalhados, atingindo um raio mínimo (periastro) e retornando ao infinito. O valor b_c determina, portanto, o raio aparente da *sombra* (*shadow*) de um buraco negro tal como observada por um observador distante — o princípio físico por trás das imagens obtidas pelo Event Horizon Telescope dos buracos negros M87* e Sagittarius A*.

1.5.4 Deflexão gravitacional da luz

Para $b \gg r_s$ (trajetórias que passam longe do corpo central, como a luz de estrelas distantes ao passar perto do Sol), a trajetória é quase retilínea, sendo apenas ligeiramente deflectida pela curvatura do espaço-tempo. Integrando a equação radial e comparando a direção assintótica de chegada com a de saída, obtém-se, em primeira ordem em r_s/b , o *ângulo de deflexão*:

$$\Delta\varphi \approx \frac{4GM}{c^2 b} = \frac{2r_s}{b}. \quad (43)$$

Para um raio de luz rasante à borda do disco solar ($b \approx$ raio do Sol), essa fórmula prevê uma deflexão de aproximadamente 1,75 segundos de arco — o dobro do valor previsto por um cálculo newtoniano ingênuo em que a luz fosse tratada como uma partícula massiva viajando a c . Essa previsão foi confirmada pela expedição de Eddington ao eclipse solar de 1919, um dos episódios mais célebres da história da física e o evento que consagrou publicamente a Relatividade Geral.

Um efeito relacionado, também derivável da mesma métrica, é o *atraso de Shapiro*: um sinal eletromagnético que passa perto de um corpo massivo leva um tempo coordenado maior para percorrer uma dada distância do que levaria no espaço-tempo plano, devido à dilatação de g_{tt} próxima à massa — efeito hoje medido rotineiramente em radares planetários e em sistemas de posicionamento (GPS), onde correções relativísticas da ordem de dezenas de microssegundos por dia são essenciais para a precisão do sistema.

2 Conclusão

Ao longo deste relatório, percorremos o caminho completo que vai da imposição de uma simetria física — estaticidade e simetria esférica — até previsões concretas e testáveis sobre o comportamento de partículas e luz na vizinhança de corpos massivos. Esse percurso ilustra, de forma particularmente clara, a metodologia da Relatividade Geral: escrever o ansatz mais geral compatível com a simetria do problema, impor as equações de campo para fixar a geometria, identificar as isometrias remanescentes e traduzi-las em quantidades conservadas, e finalmente resolver as equações de movimento resultantes.

A solução exterior de Schwarzschild mostrou-se, ao mesmo tempo, extraordinariamente simples — depende de um único parâmetro, a massa M — e extraordinariamente rica: dela decorrem o raio de Schwarzschild e a noção de horizonte de eventos, a esfera de fótons, a última órbita estável (ISCO), a precessão de periélios e a deflexão gravitacional da luz. A solução interior, por sua vez, embora baseada em um modelo idealizado de densidade uniforme, revelou algo profundo e universal: o limite de Buchdahl, que estabelece um teto absoluto de compacidade, $2GM/(c^2 R) < 8/9$, para qualquer configuração estelar estática — um resultado que aponta, já em bases puramente matemáticas, para a inevitabilidade do colapso gravitacional quando esse limite é ultrapassado.

O papel central dos campos de Killing e das quantidades que eles conservam também ficou evidente: sem a energia específica e e o momento angular específico ℓ (ou seus análogos nulos E e L), o problema geodésico em Schwarzschild — um sistema de equações diferenciais acopladas e não lineares — seria praticamente intratável analiticamente. É a existência dessas simetrias que permite reduzir o movimento tanto de partículas massivas quanto de fótons a um único problema unidimensional efetivo, formalmente análogo ao de uma partícula clássica em um potencial, tornando transparente a origem física de fenômenos como órbitas capturadas, órbitas espalhadas e a sombra dos buracos negros.

Por fim, vale destacar que os resultados aqui derivados não são meros exercícios formais: a precessão do periélio de Mercúrio, a deflexão da luz por eclipses solares, o atraso de Shapiro e, mais recentemente, a imagem direta da sombra de buracos negros supermassivos constituem uma sequência de confirmações experimentais que atravessa mais de um século, desde 1915 até os dias atuais, consolidando a métrica de Schwarzschild como um dos resultados mais bem testados — e mais fecundos — de toda a física teórica.

Referências

1. SCHUTZ, B. *A First Course in General Relativity*. 2. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2009.
2. WALD, R. M. *General Relativity*. Chicago: University of Chicago Press, 1984.
3. MISNER, C. W.; THORNE, K. S.; WHEELER, J. A. *Gravitation*. San Francisco: W. H. Freeman, 1973.
4. WEINBERG, S. *Gravitation and Cosmology: Principles and Applications of the General Theory of Relativity*. New York: Wiley, 1972.
5. HARTLE, J. B. *Gravity: An Introduction to Einstein's General Relativity*. San Francisco: Addison-Wesley, 2003.
6. CARROLL, S. M. *Spacetime and Geometry: An Introduction to General Relativity*. San Francisco: Addison-Wesley, 2004.
7. BUCHDAHL, H. A. General Relativistic Fluid Spheres. *Physical Review*, v. 116, n. 4, p. 1027–1034, 1959.
8. SCHWARZSCHILD, K. Über das Gravitationsfeld eines Massenpunktes nach der Einsteinschen Theorie. *Sitzungsberichte der Königlich Preussischen Akademie der Wissenschaften*, Berlin, p. 189–196, 1916.
9. SCHWARZSCHILD, K. Über das Gravitationsfeld einer Kugel aus inkompressibler Flüssigkeit nach der Einsteinschen Theorie. *Sitzungsberichte der Königlich Preussischen Akademie der Wissenschaften*, Berlin, p. 424–434, 1916.

Apêndice A — Revisão de Conceitos Básicos de Geometria Diferencial

Este apêndice reúne, de forma resumida, as ferramentas matemáticas de geometria diferencial empregadas ao longo do relatório, para referência rápida do leitor menos familiarizado com o formalismo tensorial da Relatividade Geral.

A.1 Métrica e elemento de linha

O objeto fundamental da RG é o *tensor métrico* $g_{\mu\nu}(x)$, um tensor simétrico de posto 2 que generaliza, para um espaço-tempo curvo, o produto escalar do espaço-tempo plano de Minkowski. Ele determina o *elemento de linha*, isto é, o intervalo infinitesimal entre dois eventos vizinhos separados por dx^μ :

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu \quad (44)$$

(soma implícita sobre índices repetidos, convenção de Einstein). O sinal de ds^2 classifica o tipo de intervalo: $ds^2 < 0$ corresponde a um intervalo *tipo-tempo* (na convenção de assinatura $(-, +, +, +)$ usada neste relatório), percorrido por partículas massivas; $ds^2 > 0$ a um intervalo *tipo-espaço*; e $ds^2 = 0$ a um intervalo *tipo-luz* (ou nulo), percorrido por fótons. O tempo próprio τ medido por um relógio qualquer é definido por $c^2 d\tau^2 = -ds^2$ ao longo de trajetórias tipo-tempo.

A.2 Símbolos de Christoffel e derivada covariante

Para diferenciar tensores de forma que o resultado ainda seja um tensor (a derivada parcial comum não o é, em coordenadas curvilíneas ou em espaços curvos), define-se a *derivada covariante* ∇ , construída a partir dos *símbolos de Christoffel*:

$$\Gamma^\lambda_{\mu\nu} = \frac{1}{2} g^{\lambda\sigma} (\partial_\mu g_{\sigma\nu} + \partial_\nu g_{\sigma\mu} - \partial_\sigma g_{\mu\nu}), \quad (45)$$

determinados inteiramente pela métrica e suas derivadas primeiras (conexão de Levi-Civita: livre de torção e compatível com a métrica, $\nabla_\lambda g_{\mu\nu} = 0$). Para um vetor V^μ , por exemplo, $\nabla_\nu V^\mu = \partial_\nu V^\mu + \Gamma^\mu_{\nu\lambda} V^\lambda$.

A.3 Geodésicas

Uma *geodésica* é a curva de “linha reta” generalizada de um espaço curvo: a trajetória que transporta paralelamente seu próprio vetor tangente, ou, equivalentemente, a trajetória de comprimento extremo (extremal) entre dois eventos. Partículas em queda livre — sujeitas apenas à gravidade — seguem geodésicas tipo-tempo (se massivas) ou nulas (se não massivas). A equação da geodésica é

$$\frac{d^2 x^\lambda}{d\sigma^2} + \Gamma^\lambda_{\mu\nu} \frac{dx^\mu}{d\sigma} \frac{dx^\nu}{d\sigma} = 0, \quad (46)$$

com $\sigma = \tau$ (tempo próprio) para geodésicas tipo-tempo, ou um parâmetro afim λ qualquer para geodésicas nulas (para as quais $d\tau = 0$ identicamente e não pode ser usado como parâmetro).

A.4 Curvatura: tensores de Riemann, Ricci e escalar

A curvatura do espaço-tempo é codificada no *tensor de Riemann*, construído a partir dos símbolos de Christoffel e suas derivadas:

$$R^\rho_{\sigma\mu\nu} = \partial_\mu \Gamma^\rho_{\nu\sigma} - \partial_\nu \Gamma^\rho_{\mu\sigma} + \Gamma^\rho_{\mu\lambda} \Gamma^\lambda_{\nu\sigma} - \Gamma^\rho_{\nu\lambda} \Gamma^\lambda_{\mu\sigma}. \quad (47)$$

Contraindo dois de seus índices, obtém-se o *tensor de Ricci*, $R_{\mu\nu} = R^\rho_{\mu\rho\nu}$, e contraindo novamente com a métrica inversa, o *escalar de curvatura* (ou escalar de Ricci), $R = g^{\mu\nu} R_{\mu\nu}$. Esses objetos, mais simples que o tensor de Riemann completo, são exatamente os que aparecem nas equações de campo de Einstein, através do *tensor de Einstein*, $G_{\mu\nu} = R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}g_{\mu\nu}R$, que satisfaz automaticamente a identidade de Bianchi contraída $\nabla^\mu G_{\mu\nu} = 0$, garantindo a conservação local de energia-momento, $\nabla^\mu T_{\mu\nu} = 0$, como consequência da geometria.

A.5 Campos de Killing

Como discutido na Seção 1.3, um campo vetorial ξ^μ é um campo de Killing se satisfaz a equação de Killing $\nabla_{(\mu}\xi_{\nu)} \equiv \frac{1}{2}(\nabla_\mu\xi_\nu + \nabla_\nu\xi_\mu) = 0$, o que equivale a dizer que ξ gera um fluxo de isometrias (transformações que preservam todas as distâncias definidas por $g_{\mu\nu}$). Cada campo de Killing corresponde a uma quantidade conservada ao longo de geodésicas, $\xi_\mu u^\mu = \text{constante}$ — o análogo relativístico geral do teorema de Noether para simetrias de espaço-tempo. Espaços-tempos maximamente simétricos (como o de Minkowski) admitem dez campos de Killing independentes (quatro translações, três rotações e três *boosts*); o espaço-tempo de Schwarzschild, por ter apenas simetria esférica e estaticidade, admite quatro (Seção 1.3.2).

A.6 Equações de campo de Einstein

A dinâmica completa da RG está contida nas equações de campo, que relacionam a geometria (lado esquerdo) ao conteúdo de matéria e energia (lado direito):

$$G_{\mu\nu} = R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}g_{\mu\nu}R = \frac{8\pi G}{c^4} T_{\mu\nu}. \quad (48)$$

Trata-se de um sistema de equações diferenciais parciais de segunda ordem, não lineares nas componentes de $g_{\mu\nu}$ (a não linearidade reflete o fato de que o próprio campo gravitacional carrega energia e, portanto, gravita). No vácuo, $T_{\mu\nu} = 0$ e as equações reduzem-se a $R_{\mu\nu} = 0$ (a equação não se reduz a $R_{\mu\nu\rho\sigma} = 0$: o tensor de Riemann pode — e em geral vai — ser não nulo mesmo no vácuo, permitindo curvatura e efeitos de maré na ausência local de matéria, como é o caso na região exterior de Schwarzschild).



GATOS INSTÁVEIS

Qubits e o teletransporte quântico

Cecília Cristina Cavalcanti dos Santos

Orientador: Prof. Dr. Gustavo Garcia Rigolin

Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos

2026

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

TURMA GATOS INSTÁVEIS

Qubits e o Teletransporte Quântico

Escola de Talentos - Instituto Principia

Autora: Cecília Cristina Cavalcanti dos Santos

Orientador: Prof. Dr. Gustavo Garcia Rigolin

Julho de 2026

Agradecimentos

Agradeço, primeiramente, à equipe de tutores e aos representantes da Escola de Talentos pela oportunidade concedida de participar deste projeto e pelo constante incentivo ao estudo e à investigação científica. O apoio oferecido por essa iniciativa foi fundamental para o desenvolvimento deste trabalho e para o aprofundamento em um tema tão instigante e enriquecedor.

Expresso também minha sincera gratidão ao meu tutor, Gustavo Rigolin, pela orientação dedicada ao longo deste projeto. Sua disposição em compartilhar conhecimentos, esclarecer dúvidas e direcionar os estudos foi essencial para que eu pudesse compreender de forma mais aprofundada a área abordada neste trabalho, além de contribuir significativamente para minha formação acadêmica.

Por fim, agradeço a todos que, direta ou indiretamente, ofereceram suporte, incentivo e encorajamento durante este percurso. Cada contribuição foi importante para tornar possível a realização deste projeto.

Qubits e o Teletransporte Quântico

por

Cecília Cristina Cavalcanti dos Santos

Resumo

Na primeira parte desta monografia, estudaremos, em nível introdutório, o formalismo matemático da mecânica quântica, concentrando nossa atenção nos sistemas quânticos mais simples: os sistemas de dois níveis, ou qubits. Utilizaremos a notação de Dirac para representar os vetores complexos que descrevem os estados quânticos, bem como para discutir operações básicas realizadas nesses sistemas. Além disso, serão analisadas algumas matrizes de transformação fundamentais, que descrevem as operações que podem ser aplicadas aos estados quânticos.

Na segunda parte da monografia, estudaremos o protocolo de teletransporte quântico, apresentando sua formulação tradicional e a sua implementação por meio de portas lógicas quânticas. Explicaremos, também, sua primeira realização experimental.

Sumário

1	Introdução Matemática	5
1.1	Definições	6
2	Os Postulados da Mecânica Quântica	16
2.1	Os postulados da mecânica quântica	16
2.2	Valor esperado	19
2.3	Qubits	20
2.4	A esfera de Bloch	21
2.5	Estados emaranhados	23
3	O protocolo de teletransporte	25
3.1	Introdução	25
3.2	O Protocolo de Teletransporte Quântico	26
3.2.1	Passo 1: Estado inicial	26
3.2.2	Reescrevendo o estado total inicial	27
3.2.3	Medida projetiva na base de Bell	28
3.2.4	Colapso e probabilidades	29
3.2.5	Comunicação clássica e correção	30
3.3	Teletransporte Quântico Utilizando Portas Lógicas	32
3.3.1	Introdução	32
3.3.2	Estado inicial	33
3.3.3	Aplicação da porta CNOT	34
3.3.4	Aplicação da porta Hadamard	35
3.3.5	Medição	37
3.3.6	Correções de Pauli	38
3.3.7	Circuito Quântico	39
3.3.8	Base de Bell	40
3.3.9	Probabilidades de Medição	40
3.3.10	Teorema da Não-Clonagem	41
3.3.11	Exemplos	41
3.3.12	Conclusão	43

4	Realização Experimental	45
4.1	Fótons e Operadores de Criação	46
4.1.1	Estados de Dois Fótons	46
4.1.2	Estados Bosônicos Idênticos	47
4.2	O Divisor de Feixe	48
4.2.1	Energia após o divisor de feixe	49
4.2.2	A fase extra devido à reflexão	50
4.2.3	Ação do BS sobre um fóton	50
4.3	Experimento de Hong-Ou-Mandel (<i>photon bunching</i>)	51
4.3.1	Comparação entre as descrições clássica e quântica	53
4.3.2	Fótons distinguíveis: comportamento clássico	54
4.4	Medidas de Bell utilizando o divisor de feixe	55
4.4.1	Caso 1: Ação do divisor de feixe sobre $ \Phi^+\rangle$	56
4.4.2	Caso 2: Ação do divisor de feixe sobre $ \Phi^-\rangle$	56
4.4.3	Caso 3: Ação do divisor de feixe sobre $ \Psi^+\rangle$	57
4.4.4	Caso 4: Ação do divisor de feixe sobre $ \Psi^-\rangle$	57
4.4.5	Interpretação Física e Medida de Bell Parcial	57
4.4.6	Estado Total Após o Beam Splitter	58
4.4.7	Probabilidades e Eficiência do Protocolo	58
4.5	Correções unitárias de Bob	59
4.5.1	Qubits fotônicos e as portas lógicas X e Z	60
4.5.2	Placas de meia onda e as portas X e Z	61
5	Conclusão	65

Capítulo 1

Introdução Matemática

Neste capítulo faremos uma apresentação preliminar de alguns elementos do arcabouço matemático que sustenta a mecânica quântica e que serão empregados no decorrer deste estudo. Nossa atenção estará voltada, principalmente, para os sistemas quânticos mais elementares, conhecidos como sistemas de dois níveis ou *qubits* (leia-se “kilbits”), peças centrais na teoria da informação quântica.

Os qubits podem ser implementados experimentalmente de diversas formas. Por exemplo, o spin de um elétron, que pode assumir dois valores (*up* ou *down*) é descrito por um qubit. O estado de polarização de um fóton (polarização horizontal ou vertical) também o é. Nas seções subsequentes elaboraremos um pouco mais sobre os aspectos físicos dos qubits. Por ora, nosso foco é apresentar sua representação matemática.

A descrição do estado de um sistema quântico se faz através de um vetor pertencente a um espaço vetorial complexo. Para representar tais estados, recorreremos à notação de Dirac. Assim, o estado mais geral de um sistema de dois níveis assume a forma

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad (1.1)$$

em que os coeficientes α e β são números complexos sujeitos à condição de normalização

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (1.2)$$

Aqui, $|z|$ denota o módulo do número complexo z .

Os vetores $|0\rangle$ e $|1\rangle$ constituem uma base ortonormal do espaço de estados associado ao sistema. Na forma matricial, esses vetores podem ser expressos como

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.3)$$

As operações sobre estados quânticos são representadas por meio de matrizes, denominadas operadores. As transformações mais importantes em sistemas de dois

níveis são descritas por matrizes unitárias (operadores unitários), cuja definição será dada mais à frente. Um exemplo de destaque é a matriz de Hadamard,

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.4)$$

cuja ação transforma os elementos da base computacional em superposições com probabilidades iguais. Operadores desse tipo são peças-chave na manipulação de qubits e voltarão a aparecer mais adiante, quando discutirmos o protocolo de teletransporte quântico.

Em linhas gerais, o formalismo matemático necessário para descrever os sistemas quânticos de dois níveis advém da álgebra linear. Conceitos como espaços vetoriais complexos, bases, operadores lineares e produtos tensoriais estarão presentes ao longo deste capítulo.

1.1 Definições

A mecânica quântica possui um elegante formalismo matemático, o qual permite descrever o comportamento microscópico de sistemas físicos com surpreendente precisão. Suas previsões nos levam a fenômenos que desafiam a intuição, como uma única partícula manifestando-se simultaneamente em vários locais distintos, ou duas partículas que permanecem correlacionadas de modo misterioso (emaranhadas), mesmo separadas por grandes distâncias.

Para investigar e descrever sistemas físicos, fazemos uso de um formalismo matemático. Assim como um pintor recorre a pincéis e tintas para dar vida a uma obra, compreender e manipular a mecânica quântica requer familiaridade com seus pincéis e tintas: a álgebra linear. Nas páginas seguintes, faremos uma revisão breve, porém fundamental, do aparato matemático necessário para o entendimento do protocolo de teletransporte quântico. Trataremos de noções básicas como vetores e espaços vetoriais, bases, independência linear e operadores, conceitos indispensáveis à construção da teoria quântica. Consultamos dois livros para elaborar este capítulo: *Principles of Quantum Mechanics* de R. Shankar [1] e *Principles of Quantum Computation and Information, Vol. 1* de G. Benenti *et al.* [2].

Ao longo deste trabalho, adotaremos a notação de Dirac, na qual estados quânticos são representados por meio de vetores linha $\langle w|$, chamados *bras*, ou por vetores coluna $|v\rangle$, denominados *kets*:

$$\langle w| = (w_1 \ w_2 \ \dots \ w_n) \quad \text{e} \quad |v\rangle = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}. \quad (1.5)$$

Utilizaremos, também, uma notação compacta para representar os *kets*. Sendo

“ T ” a operação de transposição, podemos representar o ket $|v\rangle$ da seguinte forma,

$$|v\rangle = (v_1 \ v_2 \ \dots \ v_n)^T. \quad (1.6)$$

Definição 1. Um espaço vetorial linear complexo V , de dimensão n , consiste em um conjunto de entidades chamadas vetores $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \dots, |v\rangle, |w\rangle$, fechado em relação às operações de soma e multiplicação por escalar, satisfazendo as seguintes propriedades:

1. $|v\rangle + |w\rangle = |w\rangle + |v\rangle$ (comutatividade da adição de vetores);
2. $|v\rangle + (|w\rangle + |z\rangle) = (|v\rangle + |w\rangle) + |z\rangle$ (associatividade da adição de vetores);
3. Existe um vetor nulo 0 tal que $|v\rangle + 0 = 0 + |v\rangle = |v\rangle$ (existência do vetor nulo);
4. Para cada vetor $|v\rangle$ existe um único vetor inverso tal que $|v\rangle + |-v\rangle = 0$ (existência do inverso);
5. $a(b|v\rangle) = ab|v\rangle$ (associatividade da multiplicação por escalar);
6. $a(|v\rangle + |w\rangle) = a|v\rangle + a|w\rangle$ (distributividade da multiplicação por escalar);
7. $(a+b)|v\rangle = a|v\rangle + b|v\rangle$ (distributividade da multiplicação por escalar);
8. Para qualquer $|v\rangle \in V$, $|v\rangle \cdot 1 = 1 \cdot |v\rangle = |v\rangle$ (existe a unidade multiplicativa).

Nos itens acima, $a, b \in \mathbb{C}$, isto é, são números complexos, e $|v\rangle, |w\rangle, |z\rangle \in V$.

Exemplo 1. Considere o espaço vetorial complexo $\mathbb{C}^3$. Um vetor arbitrário desse espaço pode ser escrito como

$$|\beta\rangle = b_1|\beta_1\rangle + b_2|\beta_2\rangle + b_3|\beta_3\rangle.$$

Os vetores $|\beta_1\rangle, |\beta_2\rangle$ e $|\beta_3\rangle$ podem ser expressos em termos de suas componentes:

$$|\beta_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\beta_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\beta_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Ou, de forma mais explícita:

$$|\beta\rangle = b_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + b_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}.$$

Vale ressaltar que, em (1.5), os elementos $|v\rangle$ e $\langle w|$ pertencem a espaços vetoriais distintos. Existe um mapeamento (ou correspondência) linear entre kets e bras, pois a cada ket no espaço de estados associa-se um bra correspondente no espaço dual. De maneira mais específica, cada componente do vetor coluna possui um

correspondente no vetor linha, dado pelo seu complexo conjugado. O espaço dual, portanto, é constituído por mapas lineares que atuam sobre o espaço de estados.

Definição 2. Dizemos que um vetor $|v\rangle$ é combinação linear dos vetores $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle$ quando existem escalares (números complexos) $a_1, a_2, \dots, a_n$ tais que

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^n a_i |i\rangle. \quad (1.7)$$

Definição 3. Um conjunto de vetores $|i\rangle$ é dito linearmente independente se, e somente se, a relação a seguir só for verdadeira quando todos os coeficientes a_i forem nulos:

$$\sum_{i=1}^n a_i |i\rangle = 0. \quad (1.8)$$

Ou seja, nenhum vetor do conjunto pode ser escrito como múltiplo de outro. Quando existe ao menos um coeficiente não nulo que torna a relação verdadeira, o conjunto é dito linearmente dependente. A noção de linearidade tem importância central na mecânica quântica. Os estados que descrevem sistemas físicos são vetores em um espaço vetorial complexo, e é justamente a linearidade que torna possível combiná-los para gerar novos estados, abrangendo todo o espaço de dimensão n .

Exemplo 2. Os vetores da base canônica em $\mathbb{R}^2$ (espaço real de dimensão dois),

$$\hat{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

são linearmente independentes. De fato, para que a igualdade $a_1 \hat{e}_1 + a_2 \hat{e}_2 = 0$ seja satisfeita, é necessário que tanto a_1 quanto a_2 sejam iguais a zero.

Definição 4. O produto interno entre dois vetores $|v\rangle = (v_1, \dots, v_n)^T$ e $|w\rangle = (w_1, \dots, w_n)^T$ pertencentes ao espaço vetorial complexo V é o número complexo dado por

$$\langle v|w\rangle = \sum_{i=1}^n v_i^* w_i = c, \quad (1.9)$$

onde z^* representa o complexo conjugado do número z .

O produto interno satisfaz as seguintes propriedades:

1. $\langle v|v\rangle \geq 0$ (igual a 0 somente se $|v\rangle = 0$);
2. $\langle v|w\rangle = \langle w|v\rangle^*$;
3. $\langle v|(a|w\rangle + b|z\rangle) = a\langle v|w\rangle + b\langle v|z\rangle$.

Como consequência de 1 e 2 acima, se $|\phi\rangle = a|w\rangle + b|z\rangle$ temos que $\langle \phi|v\rangle = a^* \langle w|v\rangle + b^* \langle z|v\rangle$. Em essência, o produto interno é uma extensão do conceito de produto escalar definido para espaços vetoriais reais. A diferença reside no fato de que, em vez de manipularmos vetores com componentes reais, trabalhamos agora com componentes complexas.

Exemplo 3. Considere os vetores

$$|v\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ 1+i \end{pmatrix}, \quad |w\rangle = \begin{pmatrix} i \\ 3 \end{pmatrix}.$$

O produto interno entre eles é dado por

$$\langle v|w\rangle = 2^* \cdot i + (1+i)^* \cdot 3 = 2i + (1-i) \cdot 3 = 2i + 3 - 3i = 3 - i.$$

Definição 5. A dimensão de um espaço vetorial corresponde ao número de vetores linearmente independentes capazes de gerar todo o espaço.

Definição 6. Uma base de um espaço vetorial V é um conjunto formado por n vetores linearmente independentes que geram a totalidade do espaço vetorial. Qualquer vetor pertencente a V pode ser expresso, de forma única, como combinação linear dos vetores que compõem esse conjunto.

Na equação (1.7), os vetores $|i\rangle$ representam os elementos da base, e os escalares a_i são os coeficientes que multiplicam cada um desses elementos.

Definição 7. A norma de um vetor $|v\rangle = (v_1, \dots, v_n)$ é dada por:

$$\| |v\rangle \| = \sqrt{\langle v|v\rangle} = \sqrt{\sum_{i=1}^n |v_i|^2}. \quad (1.10)$$

É possível normalizar qualquer vetor não nulo dividindo-o por sua norma. Esse vetor resultante, de norma igual a um, é chamado de vetor unitário e satisfaz a condição $\sqrt{\sum_{i=1}^n |v_i|^2} = 1$. Na mecânica quântica, um vetor que satisfaz esta última condição é chamado de vetor normalizado.

O produto interno permite definir a noção de distância entre vetores e o ângulo entre eles dentro de um espaço vetorial complexo. Conclui-se, portanto, que o produto interno estabelece a métrica do espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, conceito que abordaremos com mais detalhes a seguir.

Definição 8. Dois vetores $|v\rangle$ e $|w\rangle$ são considerados ortogonais quando seu produto interno é igual a zero:

$$\langle v|w\rangle = \sum_{i=1}^n v_i^* w_i = 0. \quad (1.11)$$

Exemplo 4. Os vetores $|v\rangle = (2, 3, -1)$ e $|w\rangle = (1, 0, 2)$ são ortogonais, uma vez que

$$\langle v|w\rangle = 2 \cdot 1 + 3 \cdot 0 + (-1) \cdot 2 = 2 + 0 - 2 = 0.$$

Definição 9. Um conjunto de vetores $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle$ é classificado como ortonormal quando

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}, \quad (1.12)$$

sendo $i, j = 1, 2, \dots, n$ e δ_{ij} a delta de Kronecker:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{se } i \neq j, \\ 1, & \text{se } i = j. \end{cases} \quad (1.13)$$

Dessa maneira, qualquer vetor pode ser decomposto em função dos vetores de uma base ortonormal por meio do produto interno:

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^n |i\rangle \langle i|v\rangle = \sum_{i=1}^n |i\rangle v_i = \sum_{i=1}^n v_i |i\rangle. \quad (1.14)$$

Note que um cálculo direto utilizando qualquer base dá que $\sum_{i=1}^n |i\rangle \langle i| = I$, onde I é a matriz identidade de dimensão n . A matriz identidade é uma matriz diagonal onde os elementos da diagonal principal são todos um e os elementos fora da diagonal são nulos. Dessa forma, $I|v\rangle = |v\rangle$ ou, equivalentemente, $\sum_{i=1}^n |i\rangle \langle i|v\rangle = |v\rangle$.

Definição 10. Chamamos de espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ um espaço vetorial complexo, completo e dotado de um produto interno.

Se a grandeza física que queremos descrever for descrita por um número contável de possibilidades, como spin up ou down para um elétron, o espaço $\mathcal{H}$ é chamado de espaço discreto. Neste caso o número de coordenadas que caracteriza um vetor desse espaço é finito e podemos associar a ele uma base discreta que obedecerá às propriedades já apresentadas neste capítulo. Por outro lado, se a grandeza física sendo descrita pertencer a um espaço vetorial não-contável (posição e momento da partícula, por exemplo), $\mathcal{H}$ é chamado de espaço contínuo. Neste cenário, os vetores que o habitam são representados por funções contínuas de determinados parâmetros e este espaço vetorial tem dimensão infinita. Neste trabalho, restringiremos nossa análise aos espaços de Hilbert discretos, uma vez que o protocolo de teletransporte aqui estudado se passa em espaços vetoriais discretos.

Definição 11. Seja $|v\rangle$ um vetor de um espaço vetorial V de dimensão n . Um operador $\hat{A}$ corresponde a uma transformação aplicada a esse vetor $|v\rangle$, levando-o a outro vetor $|v'\rangle$, também pertencente a V :

$$\hat{A}|v\rangle = |v'\rangle. \quad (1.15)$$

Os operadores podem ser classificados em lineares ou não lineares. Para qualquer par de vetores $|v\rangle$ e $|w\rangle$ e qualquer número complexo α , os operadores lineares atendem às seguintes propriedades associativas e distributivas:

1. $\hat{A}|v\rangle = \hat{B}|v\rangle$ (se e somente se $\hat{A} = \hat{B}$);
2. $\hat{A}\alpha|v\rangle = \alpha\hat{A}|v\rangle$;
3. $(\hat{A} + \hat{B})|v\rangle = \hat{A}|v\rangle + \hat{B}|v\rangle$;
4. $\hat{A}(\alpha|v\rangle + \beta|w\rangle) = \alpha\hat{A}|v\rangle + \beta\hat{A}|w\rangle$.

Aplicando a equação (1.7):

$$\hat{A}|v\rangle = \sum_{i=1}^n \hat{A}a_i|i\rangle = \sum_{i=1}^n a_i\hat{A}|i\rangle = \sum_{i=1}^n a_i|i'\rangle. \quad (1.16)$$

Mais uma vez, fica evidente a importância da linearidade. Conhecendo-se a ação do operador sobre os elementos da base, torna-se possível determinar como ele atua sobre qualquer vetor do espaço vetorial em consideração.

Definição 12. O operador identidade é aquele que, ao ser aplicado a qualquer vetor, devolve o próprio vetor:

$$I|v\rangle = |v\rangle. \quad (1.17)$$

Definição 13. O operador nulo é caracterizado por satisfazer

$$0|v\rangle = 0. \quad (1.18)$$

Definição 14. O operador inverso de um dado operador $\hat{A}$, quando existe, satisfaz

$$\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^{-1} = I. \quad (1.19)$$

A existência do inverso de um operador é garantida se, e somente se, a equação

$$\hat{A}|v\rangle = 0 \quad (1.20)$$

é satisfeita apenas se $|v\rangle$ for o vetor nulo. Além disso, A tem um inverso se, e somente se, $\det(A) \neq 0$, onde $\det(A)$ representa o determinante da matriz A . De forma direta, observa-se que

$$(\hat{A}^{-1})^{-1} = \hat{A}. \quad (1.21)$$

Já o inverso do produto entre dois operadores é dado por:

$$(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}. \quad (1.22)$$

Definição 15. Um operador U é classificado como unitário quando

$$UU^\dagger = U^\dagger U = I. \quad (1.23)$$

Em outras palavras, um operador é unitário se, e somente se,

$$U^\dagger = U^{-1}, \quad (1.24)$$

com $U^\dagger$ também unitário. Note que $U^\dagger = (U^T)^*$, isto é, a operação conhecida como “U adaga” (obtenção do operador adjunto) consiste na transposição da matriz U seguida pela conjugação complexa de todos os seus elementos. Podemos inverter a ordem destas operações sem alterar o resultado final: $(U^T)^* = (U^*)^T$.

Uma característica notável dos operadores unitários é a preservação do produto interno. Quando atuam sobre dois vetores $|v\rangle$ e $|w\rangle$, de modo que possamos definir $|u\rangle = U|v\rangle$ e $|z\rangle = U|w\rangle$, obtemos:

$$\langle u|z\rangle = (\langle v|U^\dagger)(U|w\rangle) = \langle v|U^\dagger U|w\rangle = \langle v|w\rangle. \quad (1.25)$$

No caso particular em que $|v\rangle = |w\rangle$, percebe-se que o operador unitário também conserva a norma do vetor.

Definição 16. Diz-se que o operador $\hat{A}^\dagger$ é o adjunto de $\hat{A}$ quando:

$$\langle v | (\hat{A}|w\rangle) = (\langle v|\hat{A}^\dagger) |w\rangle. \quad (1.26)$$

Definição 17. Um operador é dito Hermitiano quando $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, e anti-Hermitiano quando $\hat{A}^\dagger = -\hat{A}$. Os autovalores associados a operadores Hermitianos são sempre números reais.

A operação de tomar o adjunto de um operador equivale, de modo análogo, a tomar o complexo conjugado de um número. Como $\alpha|v\rangle = |\alpha v\rangle$ e $\langle \alpha v| = \langle v|\alpha^*$, temos:

$$\hat{A}|v\rangle = |\hat{A}v\rangle \quad \text{e} \quad \langle \hat{A}v| = \langle v|\hat{A}^\dagger. \quad (1.27)$$

Definição 18. O comutador entre dois operadores é definido pela relação

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (1.28)$$

Exemplo 5. Um exemplo amplamente conhecido envolve a não-comutatividade entre as componentes do momento angular orbital ou de spin. Para o momento angular de spin do elétron, temos,

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k, \quad (1.29)$$

onde i é a unidade imaginária, $\hat{\sigma}_i$ são as matrizes de Pauli discutidas nos capítulos seguintes, $\epsilon_{123} = \epsilon_{231} = \epsilon_{312} = 1$, $\epsilon_{213} = \epsilon_{132} = \epsilon_{321} = -1$ e $\epsilon_{ijk} = 0$ se um ou mais índices são iguais.

Pode-se mostrar que a não-comutatividade entre estes operadores implica a impossibilidade de se conhecer simultaneamente, com precisão absoluta, mais de uma componente do momento angular íntinseco (spin) do elétron. Podemos saber qual o spin do elétron ao medirmos este spin na direção z (direção 3) mas não seu valor simultaneamente nas direções x e y (direções 1 e 2). Esse comportamento ilustra mais uma das peculiaridades da mecânica quântica, onde grandezas que classicamente seriam mensuráveis em conjunto se tornam, no contexto quântico, incompatíveis entre si devido à natureza fundamental dos operadores envolvidos.

Quando dois operadores comutam entre si, o comutador associado é nulo e, portanto

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}. \quad (1.30)$$

Além do comutador, há também o anti-comutador, definido por:

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}. \quad (1.31)$$

Definição 19. Um operador linear $\hat{A}$ que atua sobre um espaço vetorial de dimensão n pode ser representado, em uma certa base, por uma coleção de n^2 números, conhecidos como elementos de matriz A_{ij} .

A equação (1.16) mostrou que, ao aplicar um operador a um vetor pertencente a um espaço vetorial complexo, sua ação se estende também à toda a base na qual esse vetor é expandido. Assim, conhecendo-se o resultado da ação do operador sobre os vetores da base, torna-se possível prever a transformação ocorrida em qualquer estado:

$$\hat{A}|v\rangle = \hat{A} \sum_i a_i |i\rangle = \sum_i a_i \hat{A}|i\rangle = \sum_i a_i |i'\rangle. \quad (1.32)$$

Se a aplicação de $\hat{A}$ em $|v\rangle$ resulta em

$$\hat{A}|v\rangle = |v'\rangle, \quad (1.33)$$

então as componentes do ket $|v'\rangle$ podem ser obtidas em função de A_{ij} e das componentes de $|v\rangle$:

$$a'_i = \langle i|v'\rangle = \langle i|\hat{A}|v\rangle = \langle i|\hat{A} \left(\sum_j a_j |j\rangle \right) = \sum_j a_j \langle i|\hat{A}|j\rangle = \sum_j A_{ij} a_j. \quad (1.34)$$

Observe que $\hat{A}|v\rangle$ retorna um novo vetor e $\langle i|\hat{A}|j\rangle$ corresponde ao elemento de matriz A_{ij} de $\hat{A}$.

Podemos reescrever a equação (1.34) em sua forma matricial, na qual a coluna n representa o n -ésimo vetor da base, já transformado pela ação do operador:

$$\begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ \vdots \\ a'_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1|\hat{A}|1\rangle & \langle 1|\hat{A}|2\rangle & \cdots & \langle 1|\hat{A}|n\rangle \\ \langle 2|\hat{A}|1\rangle & \langle 2|\hat{A}|2\rangle & \cdots & \langle 2|\hat{A}|n\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle n|\hat{A}|1\rangle & \langle n|\hat{A}|2\rangle & \cdots & \langle n|\hat{A}|n\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}. \quad (1.35)$$

Um operador também admite representação por meio do produto externo entre dois kets. A ordem em que esses objetos aparecem na notação de Dirac é crucial: o termo $\langle v|w\rangle$ resulta em um número complexo, enquanto $|v\rangle\langle w|$ produz uma matriz. Logo, é possível escrever operadores na forma matricial, em que cada elemento é determinado por (1.35).

Exemplo 6. Tomando novamente os vetores do Exemplo 3, o produto externo entre $|v\rangle$ e $|w\rangle$ resulta em

$$|v\rangle\langle w| = \begin{pmatrix} 2 \\ 1+i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2i & 6 \\ (1+i)(-i) & 3(1+i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2i & 6 \\ 1-i & 3+3i \end{pmatrix}.$$

Exemplo 7. O operador identidade pode ser representado em função de seus elementos de matriz:

$$I_{ij} = \langle i|I|j\rangle = \langle i|j\rangle = \delta_{ij}. \quad (1.36)$$

De forma explícita,

$$I_n = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.37)$$

Definição 20. A relação de completeza expressa a decomposição da matriz identidade como uma soma sobre um conjunto completo de projetores:

$$I = \sum_i |i\rangle\langle i| = \sum_i P_i. \quad (1.38)$$

O termo $P_i = |i\rangle\langle i|$ é denominado operador projeção associado ao ket $|i\rangle$. Quando esse operador atua sobre um vetor arbitrário $|v\rangle$, o resultado é um vetor proporcional ao vetor da base considerado, com coeficiente v_i que indica a parcela de $|v\rangle$ projetada na direção de $|i\rangle$:

$$P_i|v\rangle = |i\rangle\langle i|v\rangle = |i\rangle v_i. \quad (1.39)$$

A soma de todas essas projeções, em todas as direções da base, recupera o próprio vetor original. Nota-se facilmente que $P_i^2 = P_i$.

Os projetores associados aos vetores de uma base satisfazem ainda a seguinte relação:

$$P_i P_j = |i\rangle\langle i|j\rangle\langle j| = \delta_{ij} P_j. \quad (1.40)$$

Definição 21. Um autovetor de um operador linear $\hat{A}$ é definido como um vetor $|v\rangle$ não nulo tal que

$$\hat{A}|v\rangle = \alpha|v\rangle, \quad (1.41)$$

em que α é um número complexo chamado autovalor de $\hat{A}$ associado ao autovetor $|v\rangle$. A equação (1.41) é conhecida como equação do autovalor.

Utilizando as equações (1.7), (1.16) e (1.41), pode-se mostrar que a solução da equação (1.41) é obtida a partir da equação característica:

$$\det(\hat{A} - \alpha I) = 0. \quad (1.42)$$

Convém destacar que, embora a equação (1.42) seja calculada em uma base específica, os autovalores resultantes (raízes do polinômio característico) não dependem da escolha dessa base. Em outras palavras, a equação (1.42) é determinada exclusivamente pelo operador $\hat{A}$, sem qualquer relação com a representação matricial empregada.

Exemplo 8. Considere o operador $\hat{A}$ dado por

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}. \quad (1.43)$$

Podemos calcular seus autovalores e autovetores usando a equação (1.42):

$$\det(\hat{A} - \alpha I) = \begin{vmatrix} 2 - \alpha & 1 \\ 1 & 2 - \alpha \end{vmatrix} = (2 - \alpha)^2 - 1 = 0. \quad (1.44)$$

Resolvendo, encontramos $(2 - \alpha)^2 = 1$, ou seja, $\alpha_1 = 3$ e $\alpha_2 = 1$. Resolvendo a equação

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad (1.45)$$

obtemos que $|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ é o autovetor correspondente a $\alpha_1 = 3$ enquanto o autovetor associado a $\alpha_2 = 1$ é $|v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$.

Definição 22. Para todo operador Hermitiano $\hat{A}$, existe pelo menos uma base formada por seus autovetores ortonormais. Nesta base, $\hat{A}$ é diagonal, com seus autovalores ocupando as entradas da diagonal principal.

Definição 23. As matrizes de Pauli σ_x, σ_y e σ_z (ou σ_1, σ_2 e σ_3) são dadas por

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.39)$$

Muitas vezes estas matrizes são representadas, respectivamente, pelas letras X, Y e Z .

Capítulo 2

Os Postulados da Mecânica Quântica

Neste capítulo, faremos uma revisão dos postulados que servem de alicerce para a mecânica quântica, tomando como referência os seguintes dois livros para elaborar este capítulo: *Principles of Quantum Mechanics* de R. Shankar [1] e *Principles of Quantum Computation and Information, Vol. 1* de G. Benenti *et al.* [2]. Discutiremos brevemente o significado destes postulados e as implicações de cada um deles. Em seguida, retomaremos nossos estudos sobre os qubits e discutiremos os estados quânticos emaranhados, os quais se mostrarão bastante úteis na descrição matemática do protocolo de teletransporte.

2.1 Os postulados da mecânica quântica

Postulado 1. A todo sistema físico isolado associa-se um espaço vetorial complexo munido de produto interno (o espaço de Hilbert), o qual é denominado *espaço de estados* do sistema. A descrição completa do sistema é feita por seu *vetor de estado* (ou *função de onda*), um vetor unitário pertencente a esse espaço de Hilbert.

Exemplo 1. O sistema quântico mais elementar com o qual podemos lidar é o de dois níveis. O espaço de estados desse sistema possui dimensão $n = 2$. Admita que $|0\rangle$ e $|1\rangle$ constituem uma base ortonormal desse espaço. Sendo assim, qualquer vetor desse espaço vetorial pode ser escrito como uma combinação linear dos elementos da base,

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle, \quad (2.1)$$

onde a e b são números complexos. Como $|\psi\rangle$ é um vetor unitário, deve-se ter $|a|^2 + |b|^2 = 1$.

De maneira intuitiva, os estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$ se assemelham aos valores 0 e 1 assumidos por um bit clássico. Contudo, a comparação não pode ir muito longe, já que o qubit corresponde, na verdade, a uma superposição desses dois estados.

Não se pode afirmar que o qubit se encontra de forma definitiva no estado $|0\rangle$ ou no estado $|1\rangle$ antes que uma medida seja realizada sobre o sistema. Mais adiante, exploraremos os qubits com maior profundidade.

Postulado 2. A evolução de um sistema quântico isolado é descrita por uma *transformação unitária*. Em outras palavras, o estado $|\psi\rangle$ do sistema em um dado instante t_1 relaciona-se com o estado $|\psi'\rangle$ no instante t_2 por meio de um operador unitário U que depende somente dos tempos t_1 e t_2 :

$$|\psi'\rangle = U |\psi\rangle. \quad (2.2)$$

O termo “isolado” aqui significa que o sistema não interage de forma alguma com outros sistemas. É evidente que, em sentido estrito, um sistema totalmente isolado não existe (a menos que se considere o Universo como um todo), uma vez que mesmo o sistema mais isolado tende a interagir, ainda que minimamente, com sistemas vizinhos. Apesar disso, há sistemas que podem ser aproximados, com boa precisão, como se estivessem isolados. No caso particular dos sistemas de dois níveis, qualquer sistema cujos dois níveis estejam suficientemente afastados dos demais pode ser tratado, de forma aproximada, como um sistema de dois níveis isolado.

As matrizes de Pauli são exemplos de operadores que representam transformações unitárias aplicáveis a qubits. Na linguagem da computação quântica, os operadores σ_x , σ_y e σ_z de Pauli correspondem, respectivamente, às portas lógicas X, Y e Z. A porta X atua trocando $|0\rangle$ por $|1\rangle$ e $|1\rangle$ por $|0\rangle$:

$$\sigma_x |\psi\rangle = \sigma_x (\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle) = \alpha |1\rangle + \beta |0\rangle. \quad (2.3)$$

Já a porta Z preserva $|0\rangle$ sem alterações e introduz uma inversão de fase em $|1\rangle$:

$$\sigma_z |\psi\rangle = \sigma_z (\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle) = \alpha |0\rangle - \beta |1\rangle. \quad (2.4)$$

Por sua vez, a porta Y acrescenta uma fase i e permuta os valores associados a $|0\rangle$ e $|1\rangle$, ao mesmo tempo em que inverte o sinal de $|1\rangle$:

$$\sigma_y |\psi\rangle = \sigma_y (\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle) = i\alpha |1\rangle - i\beta |0\rangle. \quad (2.5)$$

O segundo postulado descreve a relação entre dois estados quânticos de um sistema isolado, separados por dois instantes de tempo distintos. Podemos refinar a definição desse postulado de modo a englobar também a evolução do sistema em um *tempo contínuo*.

Postulado 2'. A evolução temporal do estado de um sistema isolado é regida pela *Equação de Schrödinger*:

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = H |\psi\rangle, \quad (2.6)$$

sendo $\hbar$ a constante de Planck dividida por 2π e H a hamiltoniana do sistema, que corresponde a um operador hermitiano.

Uma das consequências diretas da Equação de Schrödinger é a reversibilidade da evolução temporal do sistema. Tal evolução, em um sistema quântico isolado, é *reversível*, contanto que nenhuma informação seja extraída sobre o estado do sistema. Em outras palavras, essa reversibilidade significa que, conhecendo-se o estado final e a forma como a evolução ocorreu, é possível determinar o estado inicial do sistema.

Por ser hermitiano, H admite a decomposição espectral

$$H = \sum_E E |E\rangle \langle E|, \quad (2.7)$$

com autovalores E e autovetores unitários correspondentes $|E\rangle$. Os estados $|E\rangle$ recebem o nome de *autoestados de energia* ou *estados estacionários*. A menor energia que o sistema pode assumir é chamada de *energia do estado fundamental* do sistema, e o autoestado de energia correspondente é denominado *estado fundamental*.

Postulado 3. As medidas quânticas são descritas por uma coleção $\{M_m\}$ de *operadores de medida*, que atuam sobre o espaço de estados do sistema submetido à medição. O índice m representa os possíveis resultados que o experimento pode fornecer. Se imediatamente antes da medida o sistema estiver no estado $|\psi\rangle$, a probabilidade de se obter o resultado m é

$$p(m) = \langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle \quad (2.8)$$

e o estado em que o sistema fica imediatamente após a medida é

$$\frac{M_m |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle}}. \quad (2.9)$$

Os operadores de medida obedecem à relação de completeza

$$\sum_m M_m^\dagger M_m = I, \quad (2.10)$$

o que, combinado com (2.8), garante que a soma de todas as probabilidades é igual a 1:

$$\sum_m p(m) = \sum_m \langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle = \langle \psi | \sum_m M_m^\dagger M_m | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1. \quad (2.11)$$

Exemplo 2. Vamos realizar uma medida sobre um qubit utilizando a base computacional. Existem dois resultados possíveis, descritos pelos operadores de medida $M_0 = |0\rangle \langle 0|$ e $M_1 = |1\rangle \langle 1|$. Ambos são hermitianos, e além disso $M_0^2 = M_0$, $M_1^2 = M_1$. Portanto, a relação de completeza é satisfeita:

$$I = M_0 M_0^\dagger + M_1 M_1^\dagger = M_0 + M_1. \quad (2.12)$$

Suponhamos agora o estado

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle.$$

Então, a probabilidade de obter como resultado da medida o valor 0 é

$$p(0) = \langle\psi|M_0^\dagger M_0|\psi\rangle = \langle\psi|M_0|\psi\rangle = |a|^2.$$

Analogamente, a probabilidade de obter o valor 1 é $p(1) = |b|^2$. O estado do sistema após a medida, em cada um dos casos, será

$$\begin{aligned} \frac{M_0|\psi\rangle}{|a|} &= \frac{a}{|a|}|0\rangle, \\ \frac{M_1|\psi\rangle}{|b|} &= \frac{b}{|b|}|1\rangle. \end{aligned}$$

Como os coeficientes $\frac{a}{|a|}$ e $\frac{b}{|b|}$ possuem módulo igual a um, podemos descartá-los e considerar os estados pós-medida simplesmente como $|0\rangle$ e $|1\rangle$. Em outras palavras, fases globais são irrelevantes para caracterizar um estado físico. Tanto $e^{i\theta}|\psi\rangle$ quanto $|\psi\rangle$ representam o mesmo estado.

Postulado 4. O espaço de estados de um sistema físico composto é o produto tensorial dos espaços de estados dos subsistemas que o constituem. Além disso, considerando sistemas numerados de 1 até n , e supondo que o sistema i tenha sido preparado no estado $|\psi_i\rangle$, então o estado conjunto do sistema completo é dado por $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_n\rangle$.

2.2 Valor esperado

Imaginemos um conjunto de estados $|\psi\rangle$ preparados de forma idêntica, constituindo o que chamamos de ensemble. Considere agora um operador $\hat{A}$ associado a uma grandeza física que queremos medir. Chamamos este operador de *observável* do sistema. O postulado da medida diz que **ao efetuarmos a medida de $\hat{A}$, qualquer um dos seus autovalores pode ser o resultado obtido**. Realizando essa medição em cada cópia do sistema, obtemos uma distribuição de probabilidades, em que cada autovalor λ_n está vinculado a uma probabilidade $P(\lambda_n) = |c_n|^2$. Como já discutimos na seção anterior, em geral não conhecemos o resultado exato antes da medida, apenas sendo possível obter a probabilidade de ocorrência de cada resultado. Define-se então o *valor esperado* de um observável como a média das medidas sucessivas realizadas sobre um ensemble de partículas preparadas identicamente:

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_n \lambda_n P(\lambda_n) = \sum_n \lambda_n |\langle u_n | \psi \rangle|^2, \quad (2.13)$$

sendo $|u_n\rangle$ o autovetor associado ao autovalor λ_n .

De forma alternativa, podemos utilizar a relação de completeza:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle &= \langle \psi | \mathbf{1} \hat{A} \mathbf{1} | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \left(\sum_n |u_n\rangle \langle u_n| \right) \hat{A} \left(\sum_m |u_m\rangle \langle u_m| \right) | \psi \rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle \psi | u_n \rangle \langle u_n | \hat{A} | u_m \rangle \langle u_m | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Recorrendo à equação do autovalor:

$$\begin{aligned} \sum_{n,m} \langle \psi | u_n \rangle \langle u_n | \hat{A} | u_m \rangle \langle u_m | \psi \rangle &= \sum_{n,m} \lambda_n \langle \psi | u_n \rangle \langle u_n | u_m \rangle \langle u_m | \psi \rangle \\ &= \sum_n \lambda_n |\langle u_n | \psi \rangle|^2 \\ &= \langle \hat{A} \rangle. \end{aligned} \quad (2.15)$$

2.3 Qubits

O bit clássico é a unidade fundamental de informação nos sistemas computacionais, podendo assumir os valores binários 0 e 1. Em contrapartida, o *qubit* é a unidade básica da informação quântica e pode ser realizado em qualquer sistema de dois níveis, como o spin do elétron, a polarização de um fóton ou um átomo de dois níveis com um estado fundamental e um estado excitado. Esse sistema de dois níveis é descrito por um espaço de Hilbert complexo com duas dimensões. Para construir um qubit, basta escolher um par qualquer de vetores normalizados e mutuamente ortogonais nesse espaço. Em geral, recorre-se à *base computacional*:

$$|0\rangle \equiv \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1\rangle \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (2.16)$$

Conforme discutido, qualquer estado contido nesse espaço pode ser representado como combinação linear dos vetores da base:

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle, \quad (2.17)$$

em que $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$. Já que esse estado deve ser normalizado, é necessário que $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

Vale notar que fases globais não carregam significado físico, pois não influenciam as propriedades observáveis do sistema. Sendo assim, os estados $|\psi\rangle$ e $e^{i\phi}|\psi\rangle$ levam aos mesmos resultados experimentais após uma medida. Por essa razão, é

conveniente fatorar essa fase global. De modo particular, é vantajoso escolher a fase global de modo a tornar o coeficiente de $|0\rangle$ real e não negativo (com exceção do caso em que o estado é o próprio elemento da base $|1\rangle$, onde $\alpha = 0$). Combinando esse fato com a condição de normalização, é mais conveniente trabalhar não com α e β diretamente, mas com $\alpha = \cos(\theta/2)$ e $\beta = e^{i\phi} \sin(\theta/2)$ para representar o estado genérico de um qubit:

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle = \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \end{bmatrix}, \quad (2.18)$$

sendo $0 \leq \theta \leq \pi$ e $0 \leq \phi < 2\pi$. O intervalo permitido para θ e a presença do fator $1/2$ asseguram que o qubit seja representado de modo único. Poderíamos pensar em deixar θ variar de 0 a 2π e usar o ângulo inteiro, porém essa escolha não garantiria uma caracterização única do qubit em termos dos parâmetros θ e ϕ .

Sob essa nova parametrização, há infinitos estados possíveis para o sistema. Apesar disso, um qubit não armazena uma quantidade infinita de informação. Na prática, para especificar os números complexos α e β seria necessário dispor de um ensemble de estados identicamente preparados e realizar medidas sobre um número arbitrariamente grande deles, de modo a obter, em média, os valores de α e β . A cada medida feita sobre o sistema, extrai-se apenas um único bit de informação: o autovalor relativo ao autoestado para o qual o sistema colapsa ($\sigma_n = +1$ ou $\sigma_n = -1$, no caso de uma medida do qubit feita ao longo de um eixo $\mathbf{n}$ arbitrário).

Ou seja, na prática, um sistema de dois níveis pode ser empregado como qubit desde que possa ser manipulado das seguintes formas:

1. Pode ser preparado em um estado bem definido (por exemplo, o estado $|0\rangle$).
2. Qualquer estado do qubit pode ser convertido em qualquer outro por meio de transformações unitárias.
3. O estado do qubit pode ser medido na base computacional. Em outras palavras, é possível medir a polarização do qubit ao longo do eixo z .

O operador hermitiano associado a essa medida é a matriz de Pauli σ_z , cujos autoestados são justamente os kets $|0\rangle$ e $|1\rangle$. Assim, se o qubit estiver no estado dado em (2.18), poderemos obter como resultado da medida os autovalores $\sigma_z = +1$ ou $\sigma_z = -1$, com probabilidades

$$p_0 = |\langle 0|\psi\rangle|^2 = \left(\cos \frac{\theta}{2}\right)^2 \quad \text{e} \quad p_1 = |\langle 1|\psi\rangle|^2 = \left(\sin \frac{\theta}{2}\right)^2. \quad (2.19)$$

2.4 A esfera de Bloch

A utilidade da parametrização introduzida na equação (2.18) reside na possibilidade de mapearmos todos os estados do qubit sobre a superfície de uma esfera

unitária. Em outras palavras, podemos interpretar ϕ como o ângulo azimutal e θ como o ângulo polar em coordenadas esféricas. Essa representação geométrica do qubit é conhecida como *esfera de Bloch*. A condição de normalização permite associar a cada estado do qubit um ponto sobre essa esfera. O vetor de Bloch é, portanto, um vetor cujas componentes (x, y, z) satisfazem a condição $x^2 + y^2 + z^2 = 1$. Essas coordenadas (x, y, z) da esfera de Bloch são, a menos de uma fase global, observáveis (veja Fig. 2.1).

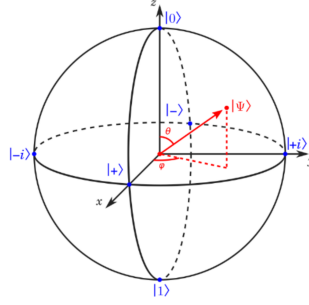


Figura 2.1: A representação da esfera de Bloch de um qubit. Um qubit pode ser completamente determinado pelos ângulos θ e ϕ , nos intervalos $0 \leq \theta \leq \pi$ e $0 \leq \phi < 2\pi$. Um qubit arbitrário pode ser escrito em termos desses ângulos como $|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle$.

Quando aplicamos as matrizes de Pauli, escritas na base computacional, ao estado dado em (2.18), obtemos

$$\sigma_x |\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2} |1\rangle + e^{i\phi} \sin\frac{\theta}{2} |0\rangle, \quad (2.20)$$

$$\sigma_y |\psi\rangle = i \cos\frac{\theta}{2} |1\rangle - i e^{i\phi} \sin\frac{\theta}{2} |0\rangle, \quad (2.21)$$

$$\sigma_z |\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2} |0\rangle - e^{i\phi} \sin\frac{\theta}{2} |1\rangle. \quad (2.22)$$

Os valores esperados de σ_x , σ_y e σ_z podem ser obtidos aplicando $\langle\psi|$ às Equações (2.20) – (2.22):

$$\langle\psi| \sigma_x |\psi\rangle = \langle\psi| \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} |\psi\rangle = \sin\theta \cos\phi = x, \quad (2.23)$$

$$\langle\psi| \sigma_y |\psi\rangle = \langle\psi| \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} |\psi\rangle = \sin\theta \sin\phi = y, \quad (2.24)$$

$$\langle\psi| \sigma_z |\psi\rangle = \langle\psi| \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} |\psi\rangle = \cos\theta = z. \quad (2.25)$$

Ao medirmos σ_z , encontramos as coordenadas (x, y, z) . De fato, fazendo uso da Equação (2.19), temos

$$p_0 - p_1 = \left(\cos \frac{\theta}{2} \right)^2 - \left(\sin \frac{\theta}{2} \right)^2 = \cos \theta = z. \quad (2.26)$$

Se dispomos de um número N suficientemente grande de sistemas preparados identicamente no mesmo estado (descrito pela Eq. (2.18)), é possível estimar z como $N_0/N - N_1/N$, em que N_0 representa a quantidade de medidas com resultado $|0\rangle$ (autovalor $+1$) e N_1 a quantidade de medidas com resultado $|1\rangle$ (autovalor -1). A conclusão é que a precisão da medida de z pode ser tornada tão alta quanto se queira, bastando que o número de medições realizadas seja suficientemente elevado. Por outro lado, para obter as coordenadas x e y , é necessário aplicar previamente transformações unitárias ao sistema. Ao agirmos com a transformação unitária

$$U_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.27)$$

sobre o estado dado em (2.18), obtemos o novo estado $|\psi^{(1)}\rangle = U_1 |\psi\rangle$. Projetando esse estado na base computacional, obtemos como resultado -1 ou 1 , com probabilidades $p_0^{(1)} = |\langle 0 | \psi^{(1)} \rangle|^2$ e $p_1^{(1)} = |\langle 1 | \psi^{(1)} \rangle|^2$, respectivamente. Logo,

$$p_0^{(1)} - p_1^{(1)} = \cos \phi \sin \theta = x. \quad (2.28)$$

De forma análoga, se o estado for transformado pela matriz

$$U_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{bmatrix} \quad (2.29)$$

obtemos $|\psi^{(2)}\rangle = U_2 |\psi\rangle$. Dessa forma,

$$p_0^{(2)} - p_1^{(2)} = \sin \phi \sin \theta = y. \quad (2.30)$$

sendo $p_0^{(2)} = |\langle 0 | \psi^{(2)} \rangle|^2$ e $p_1^{(2)} = |\langle 1 | \psi^{(2)} \rangle|^2$ as probabilidades de obter, respectivamente, os autovalores $+1$ ou -1 (kets $|0\rangle$ ou $|1\rangle$) quando medimos, por exemplo, o spin de um elétron ao longo do eixo z .

Na Figura 2.1, os estados da base computacional correspondem aos autovetores do operador Z e ocupam os polos norte e sul da esfera de Bloch. Os estados da base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$, por sua vez, são autovetores do operador X e, juntamente com os estados $\{|+i\rangle, |-i\rangle\}$, que são os autovetores de Y , estão localizados em pontos opostos no equador da esfera de Bloch.

2.5 Estados emaranhados

No Capítulo 1, vimos que estados compostos são descritos por meio do produto tensorial. Considere dois qubits cujos estados locais sejam $|\psi\rangle_A = |0\rangle$ e $|\psi\rangle_B = |0\rangle$.

O estado global do sistema, isto é, o estado conjunto dos dois qubits, é dado pelo produto tensorial entre os estados locais:

$$|\psi\rangle_{AB} = |\psi\rangle_A \otimes |\psi\rangle_B = |0\rangle \otimes |0\rangle = |00\rangle. \quad (2.31)$$

De maneira semelhante, se tivermos $|\psi\rangle_A = |0\rangle$ e $|\psi\rangle_B = |+\rangle$, sendo $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$, então o estado global resultante será

$$|\psi\rangle_{AB} = |\psi\rangle_A \otimes |\psi\rangle_B = |0\rangle \otimes |+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |01\rangle). \quad (2.32)$$

Dessa forma, obtemos o estado global a partir dos estados locais dos qubits. Mas será que o caminho inverso também é possível? Em outras palavras, dado um estado global, somos sempre capazes de recuperar os estados locais individuais de cada qubit? Vejamos.

Podemos escrever os estados locais $|\psi\rangle_A$ e $|\psi\rangle_B$, bem como o estado global $|\psi\rangle_{AB}$, da seguinte forma:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle_A &= a_0 |0\rangle + a_1 |1\rangle, \\ |\psi\rangle_B &= b_0 |0\rangle + b_1 |1\rangle, \\ |\psi\rangle_{AB} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle), \end{aligned} \quad (2.33)$$

sendo a_0, a_1, b_0, b_1 as amplitudes de probabilidade correspondentes a cada estado. O produto tensorial entre os estados locais resulta em:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle_A \otimes |\psi\rangle_B &= (a_0 |0\rangle + a_1 |1\rangle) \otimes (b_0 |0\rangle + b_1 |1\rangle) \\ &= a_0 b_0 |00\rangle + a_0 b_1 |01\rangle + a_1 b_0 |10\rangle + a_1 b_1 |11\rangle. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Comparando a Equação (2.34) com (2.33), constatamos que

$$a_0 b_0 = a_1 b_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (2.35)$$

$$a_0 b_1 = a_1 b_0 = 0. \quad (2.36)$$

Isto é, devemos ter $a_0 = 0$ ou $b_1 = 0$. Entretanto, a Equação (2.35) indica que nem a_0 nem b_1 podem ser nulos. Essa contradição revela uma propriedade exclusiva desse estado: o emaranhamento. Em suma, o estado $|\psi\rangle_{AB}$ não pode ser fatorado como produto de dois estados locais. Estados deste tipo são chamados de estados quânticos emaranhados ou simplesmente estados emaranhados. Este estado será o recurso quântico fundamental para a execução do teletransporte quântico conforme veremos a seguir.

Capítulo 3

O protocolo de teletransporte

3.1 Introdução

A informação quântica estuda o processamento e a transmissão de informação em sistemas quânticos. O estudo da informação quântica como uma disciplina coe-rente começou a emergir de fato na década de 1980 e floresceu na década de 1990. Neste período, surgiram os primeiros protocolos de informação quântica, como o protocolo de criptografia quântica BB84 [3], e os primeiros algoritmos, como os algoritmos de Deutsch-Jozsa [4] e o da fatoração de números primos de Shor [5]. Em 1992, Bennett e Wiesner apresentaram um protocolo inovador de comunicação, conhecido como codificação superdensa [6]. Este protocolo requer pares emaranhados para a sua execução, os quais também são chamados de pares EPR em homenagem ao célebre artigo de Einstein, Podolsky e Rosen sobre estados emaranhados. Esse protocolo viabilizava a transmissão de dois bits clássicos através do envio de um qubit. Pouco tempo depois, em 1993, Bennett *et al.* [7] fizeram uma descoberta ainda mais surpreendente: o protocolo de teletransporte quântico. Este protocolo possibilita a transferência de estados quânticos de um local a outro sem a necessidade de um meio contínuo entre o emissor e o receptor. A função de onda que descreve um sistema físico em A passa a descrever um outro sistema físico em B. Este “teletransporte” da função de onda só é possível se A e B compartilham um estado emaranhado.

Apesar de parecer, esta ideia não se alinha com o teletransporte frequentemente retratado na ficção científica, onde objetos ou pessoas são instantaneamente transportados de um lugar para outro. O teletransporte quântico não envolve o transporte real de matéria. Em vez disso, envolve a transferência do estado de uma partícula para outra “consumindo” emaranhamento quântico. É necessário salientar que o receptor só terá acesso completo ao estado teleportado após receber determinada informação do emissor via um canal clássico de comunicação (nenhum sinal viaja mais rápido do que a luz). Como veremos mais adiante, sem essa informação, o estado recebido não será uma reprodução exata do estado teleportado. De forma mais simples, Bob (nosso receptor) não pode afirmar nada sobre o estado recebido sem

essa informação vinda do emissor. Com isso garantimos que nenhuma informação é transmitida mais rápido do que a luz e temos os princípios da relatividade restrita satisfeitos. O teletransporte quântico também não produz cópias: ao transmitir a informação quântica de um lugar a outro, o estado original é destruído ao cabo do protocolo.

3.2 O Protocolo de Teletransporte Quântico

3.2.1 Passo 1: Estado inicial

Considere que Alice possui um qubit em um estado quântico arbitrário:

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + be^{i\phi}|1\rangle, \quad (3.1)$$

com $a, b, \phi \in \mathbb{R}$ e $a^2 + b^2 = 1$. A fase ϕ , conhecida por fase relativa, tem implicações experimentais e pode ser medida. Por outro lado, $\theta \in \mathbb{R}$, a fase global em $e^{i\theta}|\psi\rangle$, não pode ser medida. Isto é, $e^{i\theta}|\psi\rangle$ e $|\psi\rangle$ representam o mesmo estado.¹

O recurso quântico primordial para se executar o protocolo de teletransporte é um estado quântico maximamente emaranhado. Sendo assim, vamos supor que Alice e Bob compartilham um par de qubits maximamente emaranhados. Este estado é um dos quatro possíveis estados de Bell:

$$|\Phi^+\rangle_{23} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle_{23} + |11\rangle_{23}), \quad (3.2)$$

onde o qubit 2 é de Alice e o 3 é de Bob. Os quatro estados de Bell são:

$$|\Phi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle \pm |11\rangle), \quad (3.3)$$

$$|\Psi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle \pm |10\rangle). \quad (3.4)$$

O estado total inicial do sistema é dado pelo seguinte produto tensorial:

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle_1 \otimes |\Phi^+\rangle_{23}. \quad (3.5)$$

Nosso objetivo é fazer com que o qubit 3 com Bob seja dado por $|\psi\rangle$ ao final do protocolo de teletransporte. Dizemos, neste caso, que teleportamos o qubit 1 (seu estado) para o qubit 3.

¹Sabemos que a matriz densidade do estado físico puro $|\psi\rangle$ é $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$. A matriz densidade ρ é uma descrição mais geral de estados quânticos, indo além dos vetores $|\psi\rangle$. E se pode mostrar que toda a informação que podemos extrair de um sistema físico está contida em ρ [1, 2]. Ou seja, se dois sistemas tem a mesma matriz densidade, eles são fisicamente idênticos. Para o estado com fase global $|\tilde{\psi}\rangle = e^{i\theta}|\psi\rangle$ temos $\tilde{\rho} = |\tilde{\psi}\rangle\langle\tilde{\psi}| = (e^{i\theta}|\psi\rangle)(\langle\psi|e^{-i\theta}) = e^{i\theta}e^{-i\theta}|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \rho$. Isto é, $\tilde{\rho}$ e ρ são fisicamente idênticos, dados pela mesma matriz densidade.

3.2.2 Reescrevendo o estado total inicial

A Eq. (3.5) pode ser explicitamente escrita como segue,

$$|\Psi\rangle = (a|0\rangle_1 + be^{i\phi}|1\rangle_1) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle_{23} + |11\rangle_{23}). \quad (3.6)$$

Usando a **distributividade** do produto tensorial:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle = & \frac{1}{\sqrt{2}} (a|0\rangle_1 \otimes |00\rangle_{23} + a|0\rangle_1 \otimes |11\rangle_{23} + be^{i\phi}|1\rangle_1 \otimes |00\rangle_{23} \\ & + be^{i\phi}|1\rangle_1 \otimes |11\rangle_{23}). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Assim, numa notação mais compacta:

$$|0\rangle_1 \otimes |00\rangle_{23} = |000\rangle, \quad (3.8)$$

$$|0\rangle_1 \otimes |11\rangle_{23} = |011\rangle, \quad (3.9)$$

$$|1\rangle_1 \otimes |00\rangle_{23} = |100\rangle, \quad (3.10)$$

$$|1\rangle_1 \otimes |11\rangle_{23} = |111\rangle. \quad (3.11)$$

Substituindo na equação (3.6):

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (a|000\rangle + a|011\rangle + be^{i\phi}|100\rangle + be^{i\phi}|111\rangle). \quad (3.12)$$

Observa-se que o sistema de três qubits é um estado puro, resultante da combinação do qubit a ser teletransportado com o par emaranhado compartilhado.

Reorganizando a equação (3.12):

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (a|00\rangle_{12}|0\rangle_3 + a|01\rangle_{12}|1\rangle_3 + be^{i\phi}|10\rangle_{12}|0\rangle_3 + be^{i\phi}|11\rangle_{12}|1\rangle_3). \quad (3.13)$$

Usando as relações entre a base computacional e a base de Bell, isto é, isolando $|00\rangle, |11\rangle, |01\rangle, |10\rangle$ a partir das Eqs. (3.3) e (3.4), temos

$$|00\rangle_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Phi^+\rangle_{12} + |\Phi^-\rangle_{12}), \quad (3.14)$$

$$|11\rangle_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Phi^+\rangle_{12} - |\Phi^-\rangle_{12}), \quad (3.15)$$

$$|01\rangle_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Psi^+\rangle_{12} + |\Psi^-\rangle_{12}), \quad (3.16)$$

$$|10\rangle_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Psi^+\rangle_{12} - |\Psi^-\rangle_{12}). \quad (3.17)$$

Substituindo em (3.13) e simplificando, obtemos:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2} \left[|\Phi^+\rangle_{12} (a|0\rangle_3 + be^{i\phi}|1\rangle_3) + |\Phi^-\rangle_{12} (a|0\rangle_3 - be^{i\phi}|1\rangle_3) \right. \\ \left. + |\Psi^+\rangle_{12} (be^{i\phi}|0\rangle_3 + a|1\rangle_3) + |\Psi^-\rangle_{12} (-be^{i\phi}|0\rangle_3 + a|1\rangle_3) \right]. \quad (3.18)$$

É importante ressaltar que estamos apenas reescrevendo o estado total em uma base mais conveniente, já que Alice realizará medidas projetivas na base de Bell e não na base computacional. Veja que a expressão (3.18) evidencia cada resultado possível da medida de Bell sobre os qubits 1 e 2. E cada um destes resultados leva a um estado específico para o qubit 3.

3.2.3 Medida projetiva na base de Bell

Agora, Alice faz uma medida projetiva na base de Bell.

A medida de Bell é descrita pelos projetores:

$$P_{\Phi^\pm} = |\Phi^\pm\rangle_{12} \langle \Phi^\pm| \otimes I_3, \quad P_{\Psi^\pm} = |\Psi^\pm\rangle_{12} \langle \Psi^\pm| \otimes I_3, \quad (3.19)$$

que satisfazem

$$\langle B_i | B_j \rangle = \delta_{ij}, \quad \sum_{i=1}^4 P_i = I, \quad (3.20)$$

onde $|B_j\rangle = \{|\Phi^+\rangle, |\Phi^-\rangle, |\Psi^+\rangle, |\Psi^-\rangle\}$ representa a base de Bell, a qual forma um conjunto ortonormal completo no espaço de Hilbert dos qubits 1 e 2.

Aplicando os projetores sobre o estado global dos três qubits,

$$P_{\Phi^\pm} |\Psi\rangle = (|\Phi^\pm\rangle_{12} \langle \Phi^\pm| \otimes I_3) |\Psi\rangle, \quad (3.21)$$

obtemos

$$P_{\Phi^\pm} |\Psi\rangle = \frac{1}{2} |\Phi^\pm\rangle_{12} (a|0\rangle_3 \pm be^{i\phi}|1\rangle_3). \quad (3.22)$$

Para chegar a última equação, usamos a ortonormalidade da base de Bell:

$$\langle \Phi^\pm | \Phi^\pm \rangle = \langle \Psi^\pm | \Psi^\pm \rangle = 1, \quad (3.23)$$

$$\langle \Phi^\pm | \Phi^\mp \rangle = \langle \Psi^\pm | \Psi^\mp \rangle = \langle \Phi^\pm | \Psi^\pm \rangle = \langle \Phi^\pm | \Psi^\mp \rangle = 0. \quad (3.24)$$

De forma análoga para os outros projetores:

$$P_{\Psi^\pm} |\Psi\rangle = \frac{1}{2} |\Psi^\pm\rangle_{12} (\pm be^{i\phi}|0\rangle_3 + a|1\rangle_3). \quad (3.25)$$

Assim, cada projetor seleciona exatamente um dos termos da superposição obtida, eliminando os demais devido à ortonormalidade da base de Bell.

O estado obtido não é normalizado e tem a forma

$$|\tilde{\psi}_i\rangle = P_i|\Psi\rangle. \quad (3.26)$$

De acordo com os postulados da mecânica quântica já estudados, a probabilidade de medir um estado de Bell é dada por

$$p_i = \langle \tilde{\psi}_i | \tilde{\psi}_i \rangle = \langle \Psi | P_i | \Psi \rangle \quad (3.27)$$

e o estado normalizado após a medida é

$$|\psi_i\rangle = \frac{|\tilde{\psi}_i\rangle}{\sqrt{p_i}}. \quad (3.28)$$

3.2.4 Colapso e probabilidades

Após a realização da medida de Bell sobre os qubits 1 e 2, o estado do sistema colapsa para um dos quatro estados possíveis:

$$P_{\Phi^+}|\Psi\rangle, P_{\Phi^-}|\Psi\rangle, P_{\Psi^+}|\Psi\rangle, P_{\Psi^-}|\Psi\rangle. \quad (3.29)$$

Usando a Eq. (3.18), podemos escrever o estado global dos três qubits antes de qualquer medida como

$$|\psi\rangle = a|\Phi^+\rangle_{12}|\psi_1\rangle_3 + b|\Phi^-\rangle_{12}|\psi_2\rangle_3 + c|\Psi^+\rangle_{12}|\psi_3\rangle_3 + d|\Psi^-\rangle_{12}|\psi_4\rangle_3, \quad (3.30)$$

onde $a = b = c = d = \frac{1}{2}$ e $|\psi_i\rangle_3$ são todos estados normalizados.

Como todos os estados acima são normalizados, então

$$p_i = \left| \frac{1}{2} \right|^2 \quad (3.31)$$

e portanto

$$p_{\Phi^+} = p_{\Phi^-} = p_{\Psi^+} = p_{\Psi^-} = \frac{1}{4}. \quad (3.32)$$

Dessa forma, teremos 4 casos com iguais chances de ocorrerem.

Caso 1: Alice mede $|\Phi^+\rangle$

Após Alice realizar a medida de Bell e obter $|\Phi^+\rangle$, o postulado da medida diz que o estado após a medida vale

$$|\Psi\rangle \xrightarrow{\text{medida}} |\Phi^+\rangle_{12}|\psi_1\rangle_3 = |\Phi^+\rangle_{12} \otimes |\psi_1\rangle_3. \quad (3.33)$$

Ou seja, o estado dos dois qubits de Alice colapsa para $|\Phi^+\rangle$, enquanto o qubit de Bob é descrito pelo seguinte estado:

$$|\psi_1\rangle = a|0\rangle + be^{i\phi}|1\rangle. \quad (3.34)$$

Nesse caso, o estado de Bob coincide com o original teleportado por Alice (qubit 1) e o protocolo termina com sucesso sem novas intervenções.

Caso 2: Alice mede $|\Phi^-\rangle$

De forma análoga temos,

$$|\Psi\rangle \xrightarrow{\text{medida}} |\Phi^-\rangle_{12} |\psi_2\rangle_3. \quad (3.35)$$

Com isso o estado com Bob é

$$|\psi_2\rangle = a|0\rangle - be^{i\phi}|1\rangle. \quad (3.36)$$

Esse caso difere do original apenas por uma fase relativa de π radianos. Note o sinal menos antes de b , o que não existe no qubit original (qubit 1). Para termos sucesso neste caso, precisamos corrigir o estado com Bob. Voltaremos neste ponto em breve.

Caso 3: Alice mede $|\Psi^+\rangle$

Agora obtemos

$$|\Psi\rangle \xrightarrow{\text{medida}} |\Psi^+\rangle_{12} |\psi_3\rangle_3 \quad (3.37)$$

e, portanto, o estado com Bob passa a ser

$$|\psi_3\rangle = be^{i\phi}|0\rangle + a|1\rangle. \quad (3.38)$$

Nesse caso há uma troca dos estados base: $|0\rangle \leftrightarrow |1\rangle$. Vamos precisar corrigir isso para finalizar o protocolo com sucesso.

Caso 4: Alice mede $|\Psi^-\rangle$

Por fim, se Alice obter $|\Psi^-\rangle$ como resultado de sua medida de Bell, o estado dos três qubits torna-se

$$|\Psi\rangle \xrightarrow{\text{medida}} |\Psi^-\rangle_{12} |\psi_4\rangle_3. \quad (3.39)$$

Com isso, o qubit de Bob passa a ser

$$|\psi_4\rangle = -be^{i\phi}|0\rangle + a|1\rangle. \quad (3.40)$$

Agora não só trocamos os papéis entre os estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$ como também mudamos a fase relativa entre eles de π radianos. Novamente teremos que corrigir isso para finalizar o protocolo de teletransporte.

3.2.5 Comunicação clássica e correção

Alice deve informar a Bob qual foi o resultado obtido em sua medida de Bell. Como existem 4 possibilidades, essa informação pode ser codificada em dois bits clássicos que serão enviados a Bob. Por exemplo:

$$\begin{aligned}
00 &\longrightarrow \text{Alice mede } |\Phi^+\rangle, & 10 &\longrightarrow \text{Alice mede } |\Psi^+\rangle, \\
01 &\longrightarrow \text{Alice mede } |\Phi^-\rangle, & 11 &\longrightarrow \text{Alice mede } |\Psi^-\rangle.
\end{aligned}$$

Após receber esta informação, Bob sabe exatamente qual estado descreve seu qubit: $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle$ ou $|\psi_4\rangle$.

Como Bob já sabe qual é seu estado, ele pode fazer a correção apropriada para recuperar exatamente o estado teleportado $|\psi\rangle = a|0\rangle + be^{i\phi}|1\rangle$.

É interessante, nesse momento, utilizar a representação matricial para os qubits e para as correções:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ be^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.41)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.42)$$

Vamos analisar os quatro casos à luz desta notação.

Caso 1: Alice mede $|\Phi^+\rangle$

Estado de Bob:

$$|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} a \\ be^{i\phi} \end{pmatrix}. \quad (3.43)$$

Aplicando a identidade:

$$I|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ be^{i\phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ be^{i\phi} \end{pmatrix}. \quad (3.44)$$

Ou seja, aplicar a identidade corresponde a não fazer nada já que neste caso o estado com Bob é exatamente aquele teleportado por Alice.

Caso 2: Alice mede $|\Phi^-\rangle$

Estado de Bob:

$$|\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} a \\ -be^{i\phi} \end{pmatrix}. \quad (3.45)$$

Agora devemos aplicar a correção modelada matematicamente pela matriz de Pauli σ_z :

$$\sigma_z|\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ -be^{i\phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ be^{i\phi} \end{pmatrix}. \quad (3.46)$$

Assim, $|\psi\rangle$ é recuperado.

Caso 3: Alice mede $|\Psi^+\rangle$

Estado de Bob:

$$|\psi_3\rangle = \begin{pmatrix} be^{i\phi} \\ a \end{pmatrix}. \quad (3.47)$$

A correção agora necessária é aquela modelada matematicamente pela matriz de Pauli σ_x :

$$\sigma_x |\psi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} be^{i\phi} \\ a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ be^{i\phi} \end{pmatrix}. \quad (3.48)$$

Assim, $|\psi\rangle$ é recuperado.

Caso 4: Alice mede $|\Psi^-\rangle$

Estado de Bob:

$$|\psi_4\rangle = \begin{pmatrix} -be^{i\phi} \\ a \end{pmatrix}. \quad (3.49)$$

Precisamos, agora, de duas correções sucessivas. Primeiro σ_x e depois σ_z :

$$\sigma_z(\sigma_x |\psi_4\rangle) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -be^{i\phi} \\ a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ be^{i\phi} \end{pmatrix}. \quad (3.50)$$

Assim, $|\psi\rangle$ é recuperado em todos os casos.

Veja a importância da comunicação clássica. Sem essa informação, Bob não saberá qual correção implementar sobre seu qubit. Se Bob possuir essa informação, o protocolo de teletransporte funciona corretamente para qualquer estado de Bell medido. Sempre podemos corrigir o estado final com Bob a fim de termos exatamente o qubit 3 descrito pelo estado que originalmente descrevia o qubit 1.

3.3 Teletransporte Quântico Utilizando Portas Lógicas

3.3.1 Introdução

Como vimos acima, o teletransporte quântico permite transferir o estado de um qubit de um observador (Alice) para outro (Bob) utilizando emaranhamento quântico e comunicação clássica.

De forma esquemática, o protocolo requer os seguintes recursos e processos:

- um par de qubits emaranhados: estado de Bell compartilhado entre Bob e Alice;
- medida projetiva de Bell realizada por Alice;
- dois bits de comunicação clássica enviados de Alice para Bob;
- operações unitárias realizadas por Bob.

Nosso objetivo é reapresentar o protocolo de teletransporte na linguagem de portas lógicas quânticas. Dessa forma, vamos revisar o teletransporte quântico abaixo com isso em mente.

Já sabemos que desejamos transferir o estado $|\psi\rangle$ de Alice para Bob:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad (3.51)$$

onde

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (3.52)$$

O estado $|\psi\rangle$ é completamente arbitrário e, em geral, **desconhecido** por Alice. Essa é uma das características mais surpreendentes do protocolo: não é necessário que Alice saiba quais são os coeficientes α e β para que o teletransporte funcione. De fato, se Alice tentasse descobrir α e β medindo o qubit, destruiria o estado no processo, pois toda medida quântica causa o colapso da função de onda.

A ideia central é que o emaranhamento quântico, uma correlação não-clássica entre dois qubits, funciona como um “canal quântico” que permite transferir a informação quântica. Por outro lado, os dois bits enviados a Bob por um “canal clássico” serve para que ele saiba qual correção aplicar. Nenhum dos dois canais sozinho é suficiente: sem o emaranhamento, os bits clássicos não carregam informação quântica; sem os bits clássicos, Bob não sabe qual operação aplicar. É essa combinação que torna o protocolo possível.

3.3.2 Estado inicial

Antes de iniciar o protocolo, Alice e Bob precisam compartilhar um par de qubits emaranhados. Esse par é preparado no estado de Bell

$$|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle). \quad (3.53)$$

Este é um dos quatro estados de Bell, estados maximamente emaranhados de dois qubits. O primeiro qubit do par fica com Alice (qubit 2) e o segundo vai para Bob (qubit 3). É fundamental entender que esses dois qubits foram emaranhados *previamente* e depois separados fisicamente. Alice e Bob podem estar em cidades diferentes, mas seus qubits continuam correlacionados de maneira puramente quântica.

Temos, portanto, três qubits no total:

- **Qubit 1:** o qubit que Alice deseja teletransportar, no estado $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$;
- **Qubit 2:** a metade do par de Bell que está com Alice;
- **Qubit 3:** a metade do par de Bell que está com Bob.

O estado total inicial do sistema de três qubits é dado pelo produto tensorial entre o estado de Alice e o par de Bell:

$$|\Psi_0\rangle = |\psi\rangle \otimes |\Phi^+\rangle. \quad (3.54)$$

Vamos agora expandir essa expressão passo a passo, para que fique claro como o sistema se comporta. Substituindo (3.51) e (3.53) em (3.54):

$$|\Psi_0\rangle = (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle). \quad (3.55)$$

O produto tensorial é distributivo em relação à soma de vetores. Isso significa que podemos “abrir os parênteses” exatamente como faríamos com números, mas respeitando a ordem dos fatores (pois qubits diferentes ocupam posições distintas no produto tensorial). Colocando o fator $\frac{1}{\sqrt{2}}$ em evidência:

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)(|00\rangle + |11\rangle). \quad (3.56)$$

Expandindo completamente, isto é, multiplicando cada termo dentro do primeiro par de parênteses por cada termo dentro do segundo par de parênteses:

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha|000\rangle + \alpha|011\rangle + \beta|100\rangle + \beta|111\rangle). \quad (3.57)$$

Nesta notação, a ordem dos dígitos dentro de cada ket é sempre **qubit 1, qubit 2, qubit 3**. Por exemplo, $|011\rangle$ significa que o qubit 1 está no estado $|0\rangle$, o qubit 2 no estado $|1\rangle$ e o qubit 3 no estado $|1\rangle$. Essa convenção será mantida ao longo de todo o protocolo.

Observe que, neste ponto, o estado é uma superposição de quatro termos. Ainda não houve nenhuma operação por parte de Alice. O estado acima descreve matematicamente o sistema global de três qubits no instante inicial. Os próximos passos consistem em Alice aplicar portas lógicas e realizar medidas em seus dois qubits (1 e 2), de modo a “transferir” a informação quântica (o estado) do qubit 1 para o qubit 3 de Bob.

3.3.3 Aplicação da porta CNOT

A primeira operação que Alice aplica é uma porta CNOT (Controlled-NOT) entre os qubits 1 e 2, com o qubit 1 atuando como **controle** e o qubit 2 como **alvo**.

A porta CNOT funciona da seguinte maneira: ela olha o valor do qubit de controle; se ele for $|0\rangle$, o qubit alvo permanece inalterado; se for $|1\rangle$, o qubit alvo é invertido (ou seja, sofre a operação NOT, que troca $|0\rangle$ por $|1\rangle$ e vice-versa). Em notação compacta, a ação nos estados da base computacional de dois qubits é:

$$|00\rangle \rightarrow |00\rangle, \quad (\text{controle} = 0, \text{alvo não muda}), \quad (3.58)$$

$$|01\rangle \rightarrow |01\rangle, \quad (\text{controle} = 0, \text{alvo não muda}), \quad (3.59)$$

$$|10\rangle \rightarrow |11\rangle, \quad (\text{controle} = 1, \text{alvo é invertido: } 0 \rightarrow 1), \quad (3.60)$$

$$|11\rangle \rightarrow |10\rangle, \quad (\text{controle} = 1, \text{alvo é invertido: } 1 \rightarrow 0). \quad (3.61)$$

Agora, note que a CNOT atua apenas nos qubits 1 e 2 enquanto o qubit 3 (que está com Bob) não é afetado de forma alguma. Assim, ao aplicar a CNOT no estado (3.57), devemos transformar apenas os dois primeiros dígitos de cada ket, mantendo o terceiro intacto:

$$|000\rangle \rightarrow |000\rangle, \quad (3.62)$$

$$|011\rangle \rightarrow |011\rangle, \quad (3.63)$$

$$|100\rangle \rightarrow |110\rangle, \quad (3.64)$$

$$|111\rangle \rightarrow |101\rangle. \quad (3.65)$$

Logo, o estado do sistema após a aplicação da CNOT é:

$$|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha|000\rangle + \alpha|011\rangle + \beta|110\rangle + \beta|101\rangle). \quad (3.66)$$

O papel da CNOT aqui é **criar correlações** entre o qubit 1 (que carrega o estado a ser teletransportado) e o qubit 2 (que faz parte do par emaranhado com Bob). Em certo sentido, a CNOT está “espalhando” a informação de $|\psi\rangle$ para dentro do par emaranhado, iniciando o processo pelo qual essa informação chegará ao qubit 3.

3.3.4 Aplicação da porta Hadamard

A segunda operação que Alice realiza é aplicar uma porta Hadamard H exclusivamente no qubit 1. A porta Hadamard é uma das operações mais importantes em computação quântica: ela cria superposições a partir dos estados-base. Sua ação nos estados da base computacional é:

$$H|0\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad H|1\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (3.67)$$

Observe que H transforma estados “bem definidos” ($|0\rangle$ ou $|1\rangle$) em superposições com pesos iguais, mas com sinais diferentes: quando aplicada a $|0\rangle$, a superposição tem sinal positivo; quando aplicada a $|1\rangle$, tem sinal negativo. É justamente essa diferença de sinais que permitirá distinguir os resultados de medida mais adiante.

Vamos agora aplicar H ao qubit 1 de cada termo de $|\Psi_1\rangle$ em (3.66). Fazemos isso termo a termo, lembrando que a Hadamard atua apenas no **primeiro** dígito de cada ket:

$$\alpha|000\rangle \rightarrow \frac{\alpha}{\sqrt{2}}(|000\rangle + |100\rangle), \quad (3.68)$$

$$\alpha|011\rangle \rightarrow \frac{\alpha}{\sqrt{2}}(|011\rangle + |111\rangle), \quad (3.69)$$

$$\beta|110\rangle \rightarrow \frac{\beta}{\sqrt{2}}(|010\rangle - |110\rangle), \quad (3.70)$$

$$\beta|101\rangle \rightarrow \frac{\beta}{\sqrt{2}}(|001\rangle - |101\rangle). \quad (3.71)$$

Vejamos mais explicitamente um dos quatro casos acima, aquele da terceira linha: o estado $|110\rangle$ tem qubit 1 dado por $|1\rangle$. Aplicando H : $H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$. Assim, $|110\rangle$ vira $\frac{1}{\sqrt{2}}(|010\rangle - |110\rangle)$. O sinal negativo aparece sempre que o qubit 1 for dado por $|1\rangle$.

Somando todos os termos e lembrando que já havia um fator $\frac{1}{\sqrt{2}}$ em (3.66), o estado completo fica:

$$\begin{aligned} |\Psi_2\rangle = & \frac{1}{2} (\alpha|000\rangle + \alpha|100\rangle + \alpha|011\rangle + \alpha|111\rangle \\ & + \beta|010\rangle - \beta|110\rangle + \beta|001\rangle - \beta|101\rangle). \end{aligned} \quad (3.72)$$

A etapa crucial agora é **reorganizar** essa expressão, agrupando os termos de acordo com o estado dos qubits 1 e 2 (os dois primeiros dígitos). Isso nos permitirá ver claramente o que acontece com o qubit 3 (de Bob) para cada resultado possível de medida de Alice. Agrupando:

$$\boxed{|\Psi_2\rangle = \frac{1}{2} [|00\rangle (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) + |01\rangle (\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle) + |10\rangle (\alpha|0\rangle - \beta|1\rangle) + |11\rangle (\alpha|1\rangle - \beta|0\rangle)]}. \quad (3.73)$$

Podemos verificar que este agrupamento está correto examinando, por exemplo, os termos associados a $|00\rangle$: procurando em (3.72) todos os kets cujos dois primeiros dígitos são 00, encontramos $\alpha|000\rangle + \beta|001\rangle = |00\rangle (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)$. De forma análoga checamos os outros três casos.

A equação (3.73) é a expressão mais importante de todo o protocolo. Ela nos diz que:

- Se os qubits 1 e 2 estiverem em $|00\rangle$, o qubit 3 está em $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$. **Exatamente** o estado original $|\psi\rangle$.
- Se estiverem em $|01\rangle$, o qubit 3 está em $\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle$. Os coeficientes estão trocados.
- Se estiverem em $|10\rangle$, o qubit 3 está em $\alpha|0\rangle - \beta|1\rangle$. Há uma fase espúria de π radianos: $e^{i\pi} = -1$.

- Se estiverem em $|11\rangle$, o qubit 3 está em $\alpha|1\rangle - \beta|0\rangle$. Coeficientes trocados e fase espúria de π radianos.

Com exceção do primeiro caso, cada um desses outros casos corresponde a uma “versão distorcida” do estado original. E a distorção é sempre modelada por uma operação unitária simples (uma porta de Pauli). Isso significa que, em todos os casos, a informação completa do estado $|\psi\rangle$ já está codificada no qubit 3, bastando a Bob saber qual distorção ocorreu para poder corrigi-la.

3.3.5 Medição

Agora Alice mede os dois primeiros qubits (qubits 1 e 2) na base computacional $\{|0\rangle, |1\rangle\}$. Essa medida destrói qualquer superposição nos qubits medidos: o sistema “colapsa” para um dos quatro termos de (3.73), e Alice obtém um resultado clássico: dois bits de informação.

Os possíveis resultados são:

$$00, \quad 01, \quad 10, \quad 11. \quad (3.74)$$

Cada um deles ocorre com probabilidade igual a $\frac{1}{4}$ (veremos a demonstração na Seção 3.3.9).

Dependendo do resultado da medida, o qubit de Bob (qubit 3) imediatamente colapsa para um dos seguintes estados:

Resultado	Estado de Bob	Relação com $ \psi\rangle$
00	$\alpha 0\rangle + \beta 1\rangle$	igual ao original
01	$\alpha 1\rangle + \beta 0\rangle$	amplitudes permutadas
10	$\alpha 0\rangle - \beta 1\rangle$	sinal do segundo termo invertido
11	$\alpha 1\rangle - \beta 0\rangle$	ambas as distorções

A partir deste instante, Alice já não possui mais nenhuma informação quântica sobre o estado $|\psi\rangle$. Seus dois qubits colapsaram para um estado bem definido formado por combinações dos estados da base computacional: $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle$ ou $|11\rangle$. Toda a informação quântica está agora no qubit 3 de Bob, embora possivelmente “embaralhada” por uma das distorções listadas acima.

É importante observar que o colapso do qubit 3 ocorre **instantaneamente**, independentemente da distância entre Alice e Bob. No entanto, isso **não** viola a os princípios da relatividade restrita e nem permite comunicação com informação movendo-se mais rapidamente do que a velocidade da luz no vácuo. De fato, Bob não consegue extrair informação útil de seu qubit sem saber qual dos quatro resultados Alice obteve. E a informação sobre esse resultado da medida de Alice precisa chegar a Bob por meio de um canal clássico de comunicação, o qual não transmite informação a uma velocidade superior a da luz.

3.3.6 Correções de Pauli

Alice comunica a Bob o resultado de sua medição usando dois bits clássicos (por telefone, e-mail, luz, pombo-correio; qualquer meio clássico serve). Com essa informação, Bob aplica a operação corretiva adequada em seu qubit:

Resultado	Operação	Justificativa
00	I (identidade)	estado já está correto
01	X (Pauli- X)	permuta $ 0\rangle \leftrightarrow 1\rangle$
10	Z (Pauli- Z)	inverte a fase de $ 1\rangle$
11	XZ	primeiro inverte a fase, depois permuta

As matrizes de Pauli usadas são:

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.75)$$

Verifiquemos explicitamente cada caso:

Resultado 00: O estado de Bob já é $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = |\psi\rangle$. Bob aplica I (não faz nada):

$$I \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = |\psi\rangle. \quad (3.76)$$

Resultado 01: O estado de Bob é $\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle$. As amplitudes estão trocadas. Bob aplica X :

$$X \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = |\psi\rangle. \quad (3.77)$$

Resultado 10: O estado de Bob é $\alpha|0\rangle - \beta|1\rangle$. Há uma inversão de fase. Bob aplica Z :

$$Z \begin{pmatrix} \alpha \\ -\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ -\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = |\psi\rangle. \quad (3.78)$$

Resultado 11: O estado de Bob é $\alpha|1\rangle - \beta|0\rangle$. Há troca de amplitudes e inversão de fase. Bob aplica XZ :

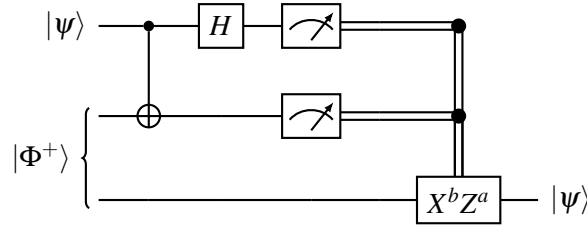
$$XZ \begin{pmatrix} -\beta \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\beta \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\beta \\ -\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\alpha \\ -\beta \end{pmatrix}. \quad (3.79)$$

O resultado $\begin{pmatrix} -\alpha \\ -\beta \end{pmatrix} = -|\psi\rangle$ difere de $|\psi\rangle$ apenas por uma fase global de -1 , que não tem significado físico (como demonstrado anteriormente quando lidamos com o operador densidade ρ). Portanto, o estado é fisicamente idêntico a $|\psi\rangle$.

Em todos os casos, Bob recupera com sucesso o estado original $|\psi\rangle$. E note que se no último caso tivéssemos trocado a ordem de aplicação das portas X e Z , teríamos exatamente $|\psi\rangle$ sem o sinal global menos. Isto é, se tivéssemos implementado ZX ao invés de XZ obteríamos diretamente $|\psi\rangle$. No entanto, como já dissemos, na mecânica quântica estados diferindo por uma fase global $e^{i\theta}$ são indistinguíveis. Os estados $|\psi\rangle$ e $e^{i\theta}|\psi\rangle$ fornecem as mesmas previsões experimentais. No caso específico aqui, $\theta = \pi$.

3.3.7 Circuito Quântico

O protocolo completo pode ser resumido de forma compacta através de um circuito quântico. A leitura do circuito se faz da esquerda para a direita, e cada fio horizontal representa um qubit:



Aqui, a e b são os bits clássicos obtidos pela medida dos qubits 1 e 2, respectivamente. Isto é, a e b podem ser 0 ou 1. E devemos interpretar a operação X^0 como sendo a identidade e X^1 como sendo X . O mesmo vale para Z^0 e Z^1 . As operações no circuito ocorrem na seguinte ordem:

1. **Preparação:** O par de Bell $|\Phi^+\rangle$ é criado a partir de dois qubits $|0\rangle$ (isso seria feito por um circuito adicional de preparação, aplicando H e CNOT, que aqui omitimos por simplicidade).
2. **CNOT:** Alice aplica a porta CNOT com controle no qubit 1 e alvo no qubit 2.
3. **Hadamard:** Alice aplica H no qubit 1.
4. **Medição:** Alice mede ambos os qubits 1 e 2 na base computacional, obtendo dois bits clássicos.
5. **Correção:** Bob aplica $X^b Z^a$ em seu qubit 3, recuperando $|\psi\rangle$.

3.3.8 Base de Bell

Para uma compreensão mais profunda do protocolo, é útil conhecer a base de Bell. Os quatro estados de Bell formam uma base ortonormal para o espaço de Hilbert de dois qubits ($\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$, que tem dimensão 4):

$$|\Phi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle \pm |11\rangle), \quad (3.80)$$

$$|\Psi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle \pm |10\rangle). \quad (3.81)$$

Cada um desses estados é maximamente emaranhado. Medindo um dos qubits sabemos qual é o estado do outro qubit com 100% de certeza. Há uma correlação perfeita entre os dois qubits.

Usando a base de Bell e as portas de Pauli (matrizes de Pauli), o estado $|\Psi_2\rangle$ [Eq. (3.73)] pode ser reescrito da seguinte forma:

$$|\Psi_2\rangle = \frac{1}{2} [|\Phi^+\rangle|\psi\rangle + |\Phi^-\rangle(Z|\psi\rangle) + |\Psi^+\rangle(X|\psi\rangle) + |\Psi^-\rangle(XZ|\psi\rangle)]. \quad (3.82)$$

Esta expressão mostra de maneira transparente a estrutura do protocolo: para cada estado de Bell obtido ao projetarmos (medirmos) os qubits 1 e 2 na base de Bell, o qubit 3 é dado pelo estado $|\psi\rangle$ a menos de uma operação lógica local (transformação unitária). E esta transformação é sempre uma porta de Pauli (incluindo a identidade I).

3.3.9 Probabilidades de Medição

Observando a Eq. (3.73), vemos que a amplitude associada a cada resultado de medição é $\frac{1}{2}$. A probabilidade de cada resultado é o quadrado do módulo da amplitude:

$$P(ij) = |\langle ij|\Psi_2\rangle|^2 \quad (3.83)$$

Então:

$$P(00) = P(01) = P(10) = P(11) = \left|\frac{1}{2}\right|^2 = \frac{1}{4}. \quad (3.84)$$

Os quatro resultados são equiprováveis, independentemente do estado $|\psi\rangle$ que está sendo teletransportado. Isso faz sentido intuitivamente: a medida de Alice não pode revelar nenhuma informação sobre $|\psi\rangle$ (pois, caso contrário, seria possível clonar estados quânticos, o que é proibido pelo Teorema da Não-Clonagem). Logo, os resultados devem ser completamente aleatórios.

3.3.10 Teorema da Não-Clonagem

O protocolo de teletransporte não viola o Teorema da Não-Clonagem. De fato, ele o respeita de maneira essencial: ao final do protocolo, o estado $|\psi\rangle$ existe apenas no qubit 3 de Bob; o qubit 1 de Alice foi destruído pela medida. Não existe cópia.

Para demonstrar o teorema, suponha existir uma operação unitária U capaz de clonar estados arbitrários:

$$U(|\psi\rangle|0\rangle) = |\psi\rangle|\psi\rangle. \quad (3.85)$$

Para dois estados arbitrários $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$:

$$U(|\psi\rangle|0\rangle) = |\psi\rangle|\psi\rangle, \quad (3.86)$$

$$U(|\phi\rangle|0\rangle) = |\phi\rangle|\phi\rangle. \quad (3.87)$$

Calculando o vetor dual da última equação (o bra) e calculando seu produto interno com a penúltima equação (e usando o fato de que U preserva o produto interno, por ser unitária):

$$\langle\psi|\phi\rangle = (\langle\psi|\phi\rangle)^2. \quad (3.88)$$

Essa equação $x = x^2$ tem como únicas soluções $x = 0$ ou $x = 1$. Isso só ocorre se

$$\langle\psi|\phi\rangle = 0 \quad (\text{estados ortogonais}) \quad (3.89)$$

ou

$$\langle\psi|\phi\rangle = 1 \quad (\text{estados idênticos}). \quad (3.90)$$

Logo, não é possível clonar estados quânticos arbitrários. Um dispositivo de clonagem só poderia clonar estados que fossem idênticos entre si ou mutuamente ortogonais — e não serve para estados desconhecidos e genéricos.

3.3.11 Exemplos

Para tornar o protocolo ainda mais concreto, vamos acompanhar três exemplos numéricos, realizando todo o cálculo passo a passo.

Estado $|0\rangle$

Queremos teletransportar $|\psi\rangle = |0\rangle$ (ou seja, $\alpha = 1, \beta = 0$).

Estado inicial:

$$|\Psi_0\rangle = |0\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle + |011\rangle). \quad (3.91)$$

Após a porta CNOT: Como o qubit 1 é $|0\rangle$ em ambos os termos, a CNOT não altera nada:

$$|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle + |011\rangle). \quad (3.92)$$

Após Hadamard no qubit 1:

$$\begin{aligned} |\Psi_2\rangle &= \frac{1}{2} \left[(|0\rangle + |1\rangle)|00\rangle + (|0\rangle + |1\rangle)|11\rangle \right] \\ &= \frac{1}{2}(|000\rangle + |100\rangle + |011\rangle + |111\rangle). \end{aligned} \quad (3.93)$$

Agrupando:

$$|\Psi_2\rangle = \frac{1}{2} \left[|00\rangle|0\rangle + |01\rangle|1\rangle + |10\rangle|0\rangle + |11\rangle|1\rangle \right]. \quad (3.94)$$

Medida e correção:

Resultado	Estado de Bob	Operação	Resultado final
00	$ 0\rangle$	I	$ 0\rangle$
01	$ 1\rangle$	X	$ 0\rangle$
10	$ 0\rangle$	Z	$ 0\rangle$
11	$ 1\rangle$	ZX	$ 0\rangle$

Estado $|1\rangle$

Queremos teletransportar $|\psi\rangle = |1\rangle$ ($\alpha = 0, \beta = 1$).

Estado inicial:

$$|\Psi_0\rangle = |1\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|100\rangle + |111\rangle). \quad (3.95)$$

Após a porta CNOT:

$$|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|110\rangle + |101\rangle). \quad (3.96)$$

Após Hadamard no qubit 1:

$$|\Psi_2\rangle = \frac{1}{2}(|010\rangle - |110\rangle + |001\rangle - |101\rangle). \quad (3.97)$$

Agrupando:

$$|\Psi_2\rangle = \frac{1}{2} \left[|00\rangle|1\rangle + |01\rangle|0\rangle - |10\rangle|1\rangle - |11\rangle|0\rangle \right]. \quad (3.98)$$

Medida e correção: Em todos os casos, Bob recupera $|1\rangle$ após a operação corretiva adequada, seguindo o padrão da tabela anterior.

Superposição $|0\rangle + |1\rangle$

Queremos teletransportar $|\psi\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$ ($\alpha = \beta = \frac{1}{\sqrt{2}}$).

Estado inicial:

$$\begin{aligned} |\Psi_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \right) (|00\rangle + |11\rangle) \\ &= \frac{1}{2} (|000\rangle + |011\rangle + |100\rangle + |111\rangle). \end{aligned} \quad (3.99)$$

Após a porta CNOT:

$$|\Psi_1\rangle = \frac{1}{2} (|000\rangle + |011\rangle + |110\rangle + |101\rangle). \quad (3.100)$$

Após Hadamard:

$$\begin{aligned} |\Psi_2\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{2}} (|000\rangle + |100\rangle + |011\rangle + |111\rangle \\ &\quad + |010\rangle - |110\rangle + |001\rangle - |101\rangle). \end{aligned} \quad (3.101)$$

Agrupando:

$$\begin{aligned} |\Psi_2\rangle &= \frac{1}{2} \left[|00\rangle \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} + |01\rangle \frac{|1\rangle + |0\rangle}{\sqrt{2}} \right. \\ &\quad \left. + |10\rangle \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} + |11\rangle \frac{|1\rangle - |0\rangle}{\sqrt{2}} \right]. \end{aligned} \quad (3.102)$$

Resultado 00: Bob obtém $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) = |+\rangle = |\psi\rangle$. Aplica I (não faz nada).

Resultado 01: Bob obtém $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) = |+\rangle = |\psi\rangle$. Aplica X (neste caso particular, $X|+\rangle = |+\rangle$).

Resultado 10: Bob obtém $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) = |-\rangle$. Aplica Z : $Z|-\rangle = |+\rangle = |\psi\rangle$.

Resultado 11: Bob obtém $\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |0\rangle) = -|-\rangle$. Aplica ZX : $ZX(-|-\rangle) = Z|-\rangle = |+\rangle = |\psi\rangle$.

3.3.12 Conclusão

O teletransporte quântico mostra que informação quântica pode ser transferida utilizando emaranhamento e comunicação clássica, sem que o estado quântico precise percorrer fisicamente o espaço entre Alice e Bob. O protocolo garante:

1. **Fidelidade perfeita:** o estado é transferido sem nenhuma degradação ou perda de informação.

2. **Não-clonagem:** o estado original é destruído no processo, respeitando o Teorema da Não-Clonagem.
3. **Impossibilidade de comunicação superluminal:** a necessidade dos dois bits clássicos impede o uso do teletransporte para enviar informação superluminal (propagando-se mais rápido que a velocidade da luz).
4. **Universalidade:** o protocolo funciona para qualquer estado $|\psi\rangle$, sem que Alice precise conhecê-lo.

Capítulo 4

Realização Experimental

Mais à frente revisitaremos novamente o protocolo de teletransporte, reescrevendo todas suas etapas numa notação que permite analisar sua primeira realização experimental [8], a qual foi feita usando-se estados de polarização de fótons para codificar os qubits. Veja a Fig. 4.1.

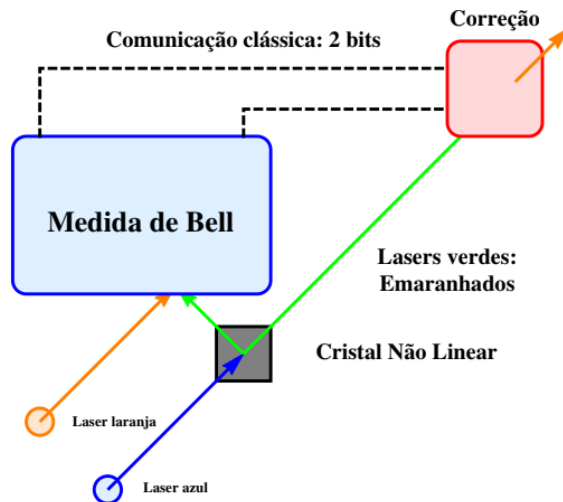


Figura 4.1: Representação esquemática do protocolo de teletransporte. Um fóton de alta frequência (laser azul) incide sobre um cristal não-linear gerando um par de fótons emaranhados de menor frequência (lasers verdes). O fóton a ser teleportado está representado pelo laser laranja. Em seguida Alice implementa uma medida de Bell envolvendo o fóton laranja e um dos fótons verde, informando Bob sobre o resultado de sua medida (2 bits de informação). Com essa informação, Bob implementa uma transformação unitária apropriada sobre seu fóton. Após essa etapa, o fóton de Bob passa a ser descrito exatamente pelo estado quântico que originalmente descrevia o fóton teleportado (laser laranja emergindo após a correção unitária). Figura e legenda extraídas da Ref. [9].

Antes de passarmos a essa descrição do protocolo de teletransporte, precisamos introduzir novos conceitos físicos, uma nova notação e também um novo postulado da mecânica quântica.

4.1 Fótons e Operadores de Criação

A formulação moderna da óptica quântica é baseada no formalismo de segunda quantização, no qual os estados do campo eletromagnético são descritos por meio de operadores de criação e aniquilação atuando sobre o estado de vácuo. Tal abordagem é particularmente adequada para a análise de experimentos envolvendo interferência quântica, medidas de Bell e teletransporte quântico envolvendo fótons.

Considere inicialmente um fóton polarizado verticalmente propagando-se ao longo de um determinado modo espacial a . Nesse caso, o estado do sistema pode ser representado por

$$|(1_V)_a\rangle = a_V^\dagger |vac\rangle, \quad (4.1)$$

onde $a_V^\dagger$ representa o operador de criação associado a um fóton de polarização vertical no modo espacial a , enquanto $|vac\rangle$ denota o estado de vácuo do campo eletromagnético. A polarização do fóton representa a direção do vetor do campo elétrico associado ao fóton. Por exemplo, um feixe de laser polarizado verticalmente é formado por trilhões de fótons de mesma frequência, energia e momento, onde o vetor polarização de todos os fótons oscilam em uníssono (coerentemente) ao longo da direção vertical. Se este feixe encontrar alguma carga elétrica, elas passaram a oscilar na direção vertical, a mesma direção da polarização.

De maneira análoga, podem ser definidos os estados correspondentes às demais combinações de polarização e caminho óptico:

$$a_H^\dagger |vac\rangle = |(1_H)_a\rangle, \quad (4.2)$$

$$b_V^\dagger |vac\rangle = |(1_V)_b\rangle, \quad (4.3)$$

$$b_H^\dagger |vac\rangle = |(1_H)_b\rangle. \quad (4.4)$$

Nesta notação, os índices a e b identificam os modos espaciais de propagação (por onde os fótons seguem), enquanto os subscritos V e H indicam as polarizações vertical e horizontal, respectivamente.

4.1.1 Estados de Dois Fótons

A partir dos operadores de criação, é possível construir estados contendo mais de um fóton. Por exemplo, um estado composto por dois fótons verticalmente polarizados, propagando-se em modos espaciais distintos, pode ser escrito como

$$a_V^\dagger b_V^\dagger |vac\rangle = |(1_V)_a(1_V)_b\rangle. \quad (4.5)$$

Equivalentemente, pode-se utilizar a notação de produto tensorial,

$$|(1_V)_a\rangle \otimes |(1_V)_b\rangle, \quad (4.6)$$

ou ainda a forma abreviada

$$|1_V\rangle_a |1_V\rangle_b. \quad (4.7)$$

De maneira semelhante, os demais estados de dois fótons distribuídos entre os modos espaciais a e b são dados por

$$a_H^\dagger b_H^\dagger |vac\rangle = |(1_H)_a (1_H)_b\rangle, \quad (4.8)$$

$$a_V^\dagger b_H^\dagger |vac\rangle = |(1_V)_a (1_H)_b\rangle, \quad (4.9)$$

$$a_H^\dagger b_V^\dagger |vac\rangle = |(1_H)_a (1_V)_b\rangle. \quad (4.10)$$

Todos esses estados encontram-se devidamente normalizados, satisfazendo

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1. \quad (4.11)$$

Além disso, como os fótons são partículas bosônicas, os operadores de criação obedecem determinadas relações de comutação. Para modos espaciais distintos,

$$a^\dagger b^\dagger = b^\dagger a^\dagger, \quad (4.12)$$

o que implica neste caso que a ordem de aplicação dos operadores não altera o estado físico obtido.

4.1.2 Estados Bosônicos Idênticos

Uma característica fundamental dos bósons, os quais são partículas de spin inteiro, manifesta-se quando múltiplas partículas ocupam exatamente o mesmo estado quântico. Considere dois fótons com mesma polarização, mesma energia e propagando-se no mesmo modo espacial (mesmo momento). O estado correspondente é descrito por

$$a_V^\dagger a_V^\dagger |vac\rangle. \quad (4.13)$$

Usando as propriedades dos operadores de criação para bósons, obtém-se

$$a_V^\dagger a_V^\dagger |vac\rangle = a_V^\dagger |(1_V)_a\rangle = \sqrt{2} |(2_V)_a\rangle. \quad (4.14)$$

De forma geral, a ação do operador de criação sobre um estado contendo n bósons do mesmo tipo é dada por

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle. \quad (4.15)$$

Essa relação constitui uma das propriedades fundamentais dos sistemas bosônicos e está diretamente associada ao fenômeno conhecido como *bunching*, segundo o qual partículas indistinguíveis bosônicas tendem a ocupar o mesmo estado quântico. Podemos pensar essa relação como mais um postulado da mecânica quântica, o qual nos diz como lidar com múltiplas partículas idênticas bosônicas.

4.2 O Divisor de Feixe

Um dos componentes fundamentais da óptica quântica experimental é o divisor de feixe (*beam splitter*), geralmente representado pela sigla BS. Um divisor de feixe balanceado é um dispositivo óptico projetado de modo a transmitir metade da intensidade luminosa incidente e refletir a outra metade.

Embora a descrição clássica indique uma divisão da intensidade do campo eletromagnético, a interpretação quântica requer uma abordagem probabilística. Quando um único fóton incide sobre um divisor de feixe ideal balanceado, existem duas possibilidades mutuamente exclusivas: transmissão ou reflexão do fóton como um todo. Ele não se divide. Cada uma dessas alternativas ocorre com probabilidade igual a 50%.

O processo de reflexão também introduz uma diferença de fase de $\frac{\pi}{2}$ radianos (90°) entre o feixe transmitido e o refletido.

Antes da interação com o divisor de feixe, o campo elétrico associado ao feixe de laser incidente pode ser descrito por meio de uma onda plana [10]

$$\vec{E}_I = \vec{E}_0 \cos(\vec{k}_a \cdot \vec{r} - \omega t), \quad (4.16)$$

onde $\vec{k}_a$ é o vetor de onda, ω a frequência angular e $\vec{E}_0$ a amplitude do campo. Note que a propagação do feixe ocorre na direção em que o vetor de onde $\vec{k}_a$ aponta ao passo que a polarização do feixe é orientada na direção do vetor $\vec{E}_0$.

Após a interação com o dispositivo, surgem dois campos distintos. O campo transmitido é dado por

$$\vec{E}_T = \frac{\vec{E}_0}{\sqrt{2}} \cos(\vec{k}_a \cdot \vec{r} - \omega t), \quad (4.17)$$

enquanto o campo refletido assume a forma

$$\vec{E}_R = \frac{\vec{E}_0}{\sqrt{2}} \cos(\vec{k}_b \cdot \vec{r} - \omega t + \frac{\pi}{2}). \quad (4.18)$$

O fator $1/\sqrt{2}$ garante a conservação da energia ou, equivalentemente, o fato de que a probabilidade de se observar um fóton refletido ou transmitido deve somar um. Devemos pensar $1/\sqrt{2}$ como o módulo da amplitude de probabilidade cujo quadrado nos dá uma probabilidade $1/2$ de transmissão ou de reflexão. Num feixe de laser, metade da intensidade é transmitida e metade é refletida, preservando-se a energia total do sistema.

4.2.1 Energia após o divisor de feixe

Vamos mostrar que após o divisor de feixe (BS), a energia total corresponde à soma das energias dos feixes transmitido e refletido. De fato, para o feixe transmitido, tem-se

$$\text{Energia}_T \propto \frac{1}{\tau} \int_0^\tau |\vec{E}_T|^2 dt, \quad (4.19)$$

onde

$$\vec{E}_T = \frac{\vec{E}_0}{\sqrt{2}} \cos(\vec{k}_a \cdot \vec{r} - \omega t) \quad (4.20)$$

e τ corresponde a um período de oscilação do campo eletromagnético. Estamos usando o fato de que a densidade de energia no campo elétrico é proporcional ($\propto$) ao quadrado do seu módulo [10].

Substituindo a Eq. (4.20) em (4.19), obtém-se

$$\text{Energia}_T \propto \frac{1}{\tau} \int_0^\tau |\vec{E}_T|^2 dt = \frac{|\vec{E}_0|^2}{2} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \cos^2(\vec{k}_a \cdot \vec{r} - \omega t) dt. \quad (4.21)$$

O fator $\frac{1}{2}$ provém de $(1/\sqrt{2})^2 = \frac{1}{2}$. Utilizando que

$$\frac{1}{\tau} \int_0^\tau \cos^2(\vec{k}_a \cdot \vec{r} - \omega t) dt = \frac{1}{2}, \quad (4.22)$$

temos

$$\boxed{\text{Energia}_T \propto \frac{|\vec{E}_0|^2}{4}}. \quad (4.23)$$

Analogamente, para o feixe refletido,

$$\boxed{\text{Energia}_R \propto \frac{|\vec{E}_0|^2}{4}}. \quad (4.24)$$

A conservação da energia é verificada de modo imediato, pois uma conta similar à anterior dá

$$\text{Energia}_I \propto \frac{|\vec{E}_0|^2}{2}. \quad (4.25)$$

Dessa forma,

$$\text{Energia}_T + \text{Energia}_R \propto \frac{|\vec{E}_0|^2}{4} + \frac{|\vec{E}_0|^2}{4} = \frac{|\vec{E}_0|^2}{2}. \quad (4.26)$$

Logo,

$$\boxed{\text{Energia}_T + \text{Energia}_R = \text{Energia}_I}. \quad (4.27)$$

Esta análise justifica, de modo intuitivo, a presença do fator $1/\sqrt{2}$ nas amplitudes.

4.2.2 A fase extra devido à reflexão

Usando a identidade de Euler,

$$e^{i\pi/2} = \cos\left(\frac{\pi}{2}\right) + i \sin\left(\frac{\pi}{2}\right), \quad (4.28)$$

e que $\cos(\pi/2) = 0$ e $\sin(\pi/2) = 1$, temos

$$\boxed{e^{i\pi/2} = i.} \quad (4.29)$$

Na representação complexa de uma onda plana [10], a fase $\pi/2$ adquirida pelo feixe refletido é representada pela unidade imaginária i . Assim, para o feixe refletido,

$$\frac{\vec{E}_0}{\sqrt{2}} e^{i(\vec{k}_b \cdot \vec{r} - \omega t + \pi/2)} = \frac{\vec{E}_0}{\sqrt{2}} e^{i(\vec{k}_b \cdot \vec{r} - \omega t)} e^{i\pi/2}, \quad (4.30)$$

e, portanto,

$$\boxed{\frac{\vec{E}_0}{\sqrt{2}} e^{i(\vec{k}_b \cdot \vec{r} - \omega t + \pi/2)} = i \frac{\vec{E}_0}{\sqrt{2}} e^{i(\vec{k}_b \cdot \vec{r} - \omega t)}. \quad (4.31)}$$

Observando os campos elétricos antes e depois de atravessarem o divisor de feixe, vemos que o campo transmitido ganha um fator de $1/\sqrt{2}$ e o campo refletido ganha um fator de $i/\sqrt{2}$. Resta, agora, adaptar a ação do divisor de feixe para o caso de um único fóton. Mais precisamente, desejamos responder à seguinte questão: *como representar matematicamente a ação do divisor de feixe sobre um fóton?* A resposta é fornecida pelos operadores de criação.

4.2.3 Ação do BS sobre um fóton

Quando um fóton incide pelo caminho a , dois processos podem ocorrer:

1. transmissão, com o fóton continuando pelo caminho a ;
2. reflexão, com atraso de fase de $\pi/2$ radianos e o fóton indo pelo caminho b .

A ação do divisor de feixe sobre o operador de criação associado ao caminho a é

$$\boxed{a^\dagger \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger + \frac{i}{\sqrt{2}} b^\dagger.} \quad (4.32)$$

Interpretação. Como

$$\left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2} = 50\%, \quad (4.33)$$

existe uma probabilidade de 50% de o fóton prosseguir pelo caminho a e de 50% de ser refletido para o caminho b . O número complexo i representa a fase de $\pi/2$ adquirida pelo fóton refletido, uma vez que $e^{i\pi/2} = i$.

De modo análogo, quando o fóton incide pelo caminho b , a ação do divisor de feixes é

$$b^\dagger \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} b^\dagger + \frac{i}{\sqrt{2}} a^\dagger, \quad (4.34)$$

ou, em ordem alfabética,

$$\boxed{b^\dagger \longrightarrow \frac{i}{\sqrt{2}} a^\dagger + \frac{1}{\sqrt{2}} b^\dagger.} \quad (4.35)$$

A ação do BS pode ser representada matricialmente por

$$\begin{pmatrix} a^\dagger \\ b^\dagger \end{pmatrix}_{\text{fim}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^\dagger \\ b^\dagger \end{pmatrix}_{\text{início}}. \quad (4.36)$$

Em síntese, as relações fundamentais utilizadas adiante são

$$\boxed{a_\varepsilon^\dagger \xrightarrow{\text{BS}} \frac{1}{\sqrt{2}} a_\varepsilon^\dagger + \frac{i}{\sqrt{2}} b_\varepsilon^\dagger} \quad (4.37)$$

$$\boxed{b_\varepsilon^\dagger \xrightarrow{\text{BS}} \frac{i}{\sqrt{2}} a_\varepsilon^\dagger + \frac{1}{\sqrt{2}} b_\varepsilon^\dagger} \quad (4.38)$$

em que $\varepsilon = V, H$. Aqui, V e H denotam dois estados de polarização ortogonais do fóton: vertical e horizontal, respectivamente.

4.3 Experimento de Hong-Ou-Mandel (*photon bunching*)

O experimento de Hong-Ou-Mandel ilustra de forma clara o aspecto bosônico dos fótons quando estes incidem sobre um divisor de feixe. Vamos analisar o que ocorre quando enviamos dois fótons simultaneamente a um divisor de feixe, um pelo caminho a e outro pelo caminho b . Veja Fig. 4.2. Supomos, também, que os fótons incidentes sejam idênticos, isto é, possuem a mesma polarização, energia e momento. Em outras palavras, eles têm todos os números quânticos idênticos.

Estado antes do BS

O estado inicial é

$$|\psi\rangle_{\text{in}} = a_V^\dagger b_V^\dagger |\text{vac}\rangle, \quad (4.39)$$

ou, equivalentemente,

$$|\psi\rangle_{\text{in}} = |1_V\rangle_a \otimes |1_V\rangle_b. \quad (4.40)$$

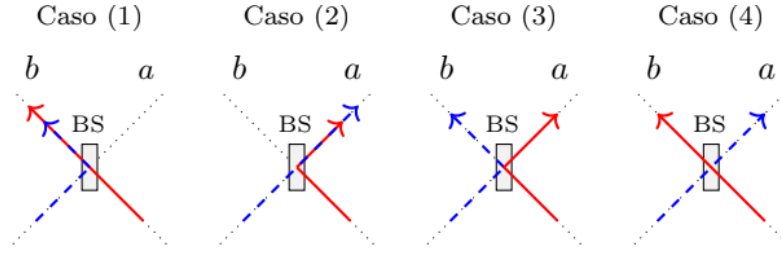


Figura 4.2: Duas partículas, cada uma vindo por caminhos diferentes (a e b), atingem um divisor de feixe balanceado (BS), o qual reflete cada partícula incidente 50% das vezes. Para partículas distinguíveis ou partículas “clássicas”, os quatro casos retratados na figura ocorrem com iguais chances (25% das vezes). No caso (1), as duas partículas seguem pelo caminho “b” após o divisor de feixe refletir apenas aquela vindo por “a”. No caso (2), ambas as partículas seguem por “a” após a partícula vindo por “b” ser refletida. No caso (3) as duas partículas são refletidas e no caso (4) ambas atravessam o divisor de feixe sem reflexão. Nestes dois últimos casos as duas partículas seguem por caminhos distintos após o divisor de feixe. Para bósons indistinguíveis, os casos (3) e (4) não ocorrem. Neste cenário, temos 50% de chance de ver as duas partículas no caminho “a” e 50% de chance de vê-las no caminho “b” após o divisor de feixe. Fótons com mesma polarização e frequência (energia) ao atingirem o divisor de feixe no mesmo instante tornam-se indistinguíveis. Não temos como saber, mesmo em princípio, qual fóton foi refletido e qual foi transmitido. Figura e legenda extraídas da Ref. [9].

Estado após o BS

Aplicando as transformações dos operadores de criação,

$$a_V^\dagger b_V^\dagger |\text{vac}\rangle \xrightarrow{\text{BS}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} a_V^\dagger + \frac{i}{\sqrt{2}} b_V^\dagger \right) \left(\frac{i}{\sqrt{2}} a_V^\dagger + \frac{1}{\sqrt{2}} b_V^\dagger \right) |\text{vac}\rangle = |\psi\rangle_{\text{fim}}. \quad (4.41)$$

Expandindo o produto,

$$|\psi\rangle_{\text{fim}} = \left(\frac{i}{2} a_V^\dagger a_V^\dagger + \frac{1}{2} a_V^\dagger b_V^\dagger - \frac{1}{2} b_V^\dagger a_V^\dagger + \frac{i}{2} b_V^\dagger b_V^\dagger \right) |\text{vac}\rangle. \quad (4.42)$$

Como os operadores de criação bosônicos comutam, $a_V^\dagger b_V^\dagger = b_V^\dagger a_V^\dagger$, os termos cruzados se cancelam:

$$\frac{1}{2} a_V^\dagger b_V^\dagger - \frac{1}{2} b_V^\dagger a_V^\dagger = 0. \quad (4.43)$$

Logo,

$$|\psi\rangle_{\text{fim}} = \frac{i}{2} \left(a_V^\dagger a_V^\dagger + b_V^\dagger b_V^\dagger \right) |\text{vac}\rangle. \quad (4.44)$$

Reescrevendo cada termo,

$$|\psi\rangle_{\text{fim}} = \frac{i}{2} a_V^\dagger |1_V\rangle_a |0_V\rangle_b + \frac{i}{2} b_V^\dagger |0_V\rangle_a |1_V\rangle_b. \quad (4.45)$$

Empregando a regra bosônica $a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$,

$$a_V^\dagger |1_V\rangle_a = \sqrt{2} |2_V\rangle_a, \quad b_V^\dagger |1_V\rangle_b = \sqrt{2} |2_V\rangle_b, \quad (4.46)$$

de modo que

$$|\psi\rangle_{\text{fim}} = \frac{i\sqrt{2}}{2} |2_V\rangle_a |0_V\rangle_b + \frac{i\sqrt{2}}{2} |0_V\rangle_a |2_V\rangle_b. \quad (4.47)$$

Ou seja,

$$|\psi\rangle_{\text{fim}} = \frac{i}{\sqrt{2}} |2_V\rangle_a |0_V\rangle_b + \frac{i}{\sqrt{2}} |0_V\rangle_a |2_V\rangle_b \quad (4.48)$$

Como

$$\left| \frac{i}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2} = 50\%, \quad (4.49)$$

obtém-se:

- 50% de probabilidade de observar dois fótons pelo caminho a ,
- 50% de probabilidade de observar dois fótons pelo caminho b .

Nunca se observa um fóton pelo caminho a e outro pelo caminho b . Temos aqui um efeito genuinamente quântico.

4.3.1 Comparação entre as descrições clássica e quântica

Descrição clássica

Classicamente, há quatro possibilidades equiprováveis, cada uma com probabilidade de 25%:

1. ambos os fótons saem pelo caminho a ;
2. um fóton sai por a e outro por b ;
3. um fóton sai por b e outro por a ;
4. ambos os fótons saem pelo caminho b .

Em particular, os eventos com um fóton em cada saída teriam probabilidade total de 50%.

Descrição quântica

Para fótons indistinguíveis, os eventos em que se observa um fóton em cada saída *não ocorrem*. As únicas possibilidades são:

- ambos os fótons no caminho *a*, com probabilidade 50%;
- ambos os fótons no caminho *b*, com probabilidade 50%.

A indistinguibilidade dos fótons é a origem do fenômeno de *bunching*: após o BS, os fótons agrupam-se à esquerda ou à direita do divisor, jamais se separando. Matematicamente, isso é consequência das propriedades de comutação e de ação dos operadores de criação no estado de vácuo ou em estados com fótons já presentes.

4.3.2 Fótons distinguíveis: comportamento clássico

Quando os fótons são distinguíveis, o comportamento clássico é recuperado. Seja o estado inicial com polarizações distintas,

$$|\psi\rangle_{\text{in}} = a_V^\dagger b_H^\dagger |\text{vac}\rangle = |1_V\rangle_a |1_H\rangle_b. \quad (4.50)$$

Aplicando as transformações

$$a_V^\dagger \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} a_V^\dagger + \frac{i}{\sqrt{2}} b_V^\dagger, \quad b_H^\dagger \longrightarrow \frac{i}{\sqrt{2}} a_H^\dagger + \frac{1}{\sqrt{2}} b_H^\dagger, \quad (4.51)$$

obtem-se

$$a_V^\dagger b_H^\dagger |\text{vac}\rangle \xrightarrow{\text{BS}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} a_V^\dagger + \frac{i}{\sqrt{2}} b_V^\dagger \right) \left(\frac{i}{\sqrt{2}} a_H^\dagger + \frac{1}{\sqrt{2}} b_H^\dagger \right) |\text{vac}\rangle. \quad (4.52)$$

Expandindo o produto,

$$|\psi\rangle_{\text{fim}} = \left(\frac{i}{2} a_V^\dagger a_H^\dagger + \frac{1}{2} a_V^\dagger b_H^\dagger - \frac{1}{2} a_H^\dagger b_V^\dagger + \frac{i}{2} b_V^\dagger b_H^\dagger \right) |\text{vac}\rangle. \quad (4.53)$$

Os termos cruzados *não se cancelam*, pois os fótons possuem polarizações distintas. Em termos de estados,

$$|\psi\rangle_{\text{fim}} = \frac{i}{2} |1_V, 1_H\rangle_a + \frac{1}{2} |1_V\rangle_a |1_H\rangle_b - \frac{1}{2} |1_H\rangle_a |1_V\rangle_b + \frac{i}{2} |1_V, 1_H\rangle_b \quad (4.54)$$

As probabilidades associadas são:

$$\left| \frac{i}{2} \right|^2 = \frac{1}{4} \quad (\text{dois fótons em } a), \quad (4.55)$$

$$\left| \frac{1}{2} \right|^2 = \frac{1}{4} \quad (\text{um fóton } V \text{ em } a \text{ e um fóton } H \text{ em } b), \quad (4.56)$$

$$\left| -\frac{1}{2} \right|^2 = \frac{1}{4} \quad (\text{um fóton } H \text{ em } a \text{ e um fóton } V \text{ em } b), \quad (4.57)$$

$$\left| \frac{i}{2} \right|^2 = \frac{1}{4} \quad (\text{dois fótons em } b). \quad (4.58)$$

Assim, no caso de fótons distinguíveis, obtemos as quatro possibilidades clássicas, cada uma ocorrendo 25% das vezes.

4.4 Medidas de Bell utilizando o divisor de feixe

Tendo-se estabelecido o formalismo matemático para modelar a ação do divisor de feixe sobre fótons incidentes e desenvolvido a intuição física de seu funcionamento a partir do efeito Hong-Ou-Mandel, é possível agora demonstrar como o divisor de feixe permite medir 2 dos 4 estados de Bell.

Como será visto, usando um divisor de feixe conseguimos distinguir apenas

$$|\psi^-\rangle \text{ e } |\psi^+\rangle. \quad (4.59)$$

Não seremos capazes de diferenciar entre

$$|\phi^+\rangle \text{ e } |\phi^-\rangle \quad (4.60)$$

por meio deste dispositivo óptico.

Dessa forma, o protocolo de teletransporte funciona apenas *condicionalmente* ao usarmos um divisor de feixe para realizar as medições de Bell. No experimento original de 1997 realizado pelo grupo de Anton Zeilinger [8], havia ainda uma outra limitação experimental que explicaremos mais à frente e somente $|\psi^-\rangle$ era mensurável, de modo que o protocolo era bem-sucedido em apenas 25% das tentativas.

Usando a notação desenvolvida neste capítulo, a Eq. (3.18) que representa o estado global dos três qubits no início do protocolo de teletransporte pode ser posta da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle = & \frac{1}{2} |\phi^+\rangle (\alpha |V\rangle + \beta |H\rangle) + \frac{1}{2} |\phi^-\rangle (\alpha |V\rangle - \beta |H\rangle) \\ & + \frac{1}{2} |\psi^+\rangle (\alpha |H\rangle + \beta |V\rangle) + \frac{1}{2} |\psi^-\rangle (\alpha |H\rangle - \beta |V\rangle). \end{aligned} \quad (4.61)$$

Agora, os três qubits denotam o estado de polarização de três fótons. Para chegar à Eq. (4.61), renomeamos na Eq. (3.18) $|0\rangle$ por $|V\rangle$, $|1\rangle$ por $|H\rangle$, a por α e $be^{i\phi}$ por β .

Por completeza, escrevemos aqui o estado de entrada, o fóton a ser teletransportado por Alice (qubit 1):

$$\alpha |V\rangle + \beta |H\rangle. \quad (4.62)$$

Para realizar a medida de Bell, enviamos os dois fótons em posse de Alice a um divisor de feixe e analisamos os estados dos fótons resultantes após o divisor. Os estados $|\phi^\pm\rangle$ e $|\psi^\pm\rangle$ correspondem aos dois fótons de Alice, sobre os quais aplicaremos a operação matemática que modela a ação do divisor de feixe. Representamos essa operação por $\text{BS} \otimes I$. Sua ação no estado dado pela Eq. (4.61) é

$$(\text{BS} \otimes I) |\Psi\rangle. \quad (4.63)$$

O símbolo BS representa a matriz 2×2 que descreve a ação do divisor de feixe sobre os operadores de criação dos dois fótons de Alice. O operador identidade

I indica que nenhuma operação é realizada sobre o terceiro qubit, isto é, sobre o fóton de Bob.

Para que os cálculos permaneçam claros, o procedimento será dividido em duas partes:

1. uma análise individual para cada um dos estados de Bell acima;
2. a posterior reunião dos resultados para a análise final.

4.4.1 Caso 1: Ação do divisor de feixe sobre $|\Phi^+\rangle$

O estado inicial a ser considerado é da forma:

$$(\text{BS} \otimes \mathbb{I})|\psi\rangle = \frac{1}{2} \underbrace{\text{BS}|\Phi^+\rangle}_{\text{divisor de feixe}} \otimes (\alpha|V\rangle + \beta|H\rangle) + \dots$$

Mas temos que:

$$|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle_a|H\rangle_b + |V\rangle_a|V\rangle_b) = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_H^\dagger b_H^\dagger + a_V^\dagger b_V^\dagger)|0\rangle.$$

Aplicando a operação associada ao divisor de feixe,

$$a^\dagger \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}a^\dagger + \frac{i}{\sqrt{2}}b^\dagger, \quad b^\dagger \rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}}a^\dagger + \frac{1}{\sqrt{2}}b^\dagger,$$

temos após a expansão e simplificação algébrica (os termos cruzados se cancelam):

$$\text{BS}|\Phi^+\rangle = \frac{i}{2\sqrt{2}}(a_V^{\dagger 2} + b_V^{\dagger 2} + a_H^{\dagger 2} + b_H^{\dagger 2})|0\rangle.$$

Convertendo para notação de números de fótons:

$$\text{BS}|\Phi^+\rangle = \frac{i}{2}(|2_V, 0\rangle_a + |0, 2_V\rangle_b + |2_H, 0\rangle_a + |0, 2_H\rangle_b).$$

Ou equivalentemente,

$$\boxed{\text{BS}|\Phi^+\rangle = \frac{i}{2}(|2_V\rangle_a|0\rangle_b + |2_H\rangle_a|0\rangle_b + |0\rangle_a|2_V\rangle_b + |0\rangle_a|2_H\rangle_b).} \quad (4.64)$$

4.4.2 Caso 2: Ação do divisor de feixe sobre $|\Phi^-\rangle$

Para o estado $|\Phi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|VV\rangle - |HH\rangle)$, a aplicação do BS segue de forma análoga, alterando o sinal relativo entre os termos de polarização horizontal e vertical:

$$\boxed{\text{BS}|\Phi^-\rangle = \frac{i}{2}(|2_V\rangle_a|0\rangle_b - |2_H\rangle_a|0\rangle_b + |0\rangle_a|2_V\rangle_b - |0\rangle_a|2_H\rangle_b).} \quad (4.65)$$

4.4.3 Caso 3: Ação do divisor de feixe sobre $|\Psi^+\rangle$

O estado $|\Psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|VH\rangle + |HV\rangle)$ leva a:

$$\text{BS}|\Psi^+\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(a_V^\dagger a_H^\dagger + b_V^\dagger b_H^\dagger)|0\rangle.$$

Ou seja, temos:

$$\boxed{\text{BS}|\Psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1_V 1_H\rangle_a |0\rangle_b + |0\rangle_a |1_V 1_H\rangle_b).} \quad (4.66)$$

4.4.4 Caso 4: Ação do divisor de feixe sobre $|\Psi^-\rangle$

Como $|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|VH\rangle - |HV\rangle)$, o resultado é:

$$\text{BS}|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_V^\dagger b_H^\dagger - a_H^\dagger b_V^\dagger)|0\rangle.$$

Isto é,

$$\boxed{\text{BS}|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1_V\rangle_a |1_H\rangle_b - |1_H\rangle_a |1_V\rangle_b).} \quad (4.67)$$

Este estado corresponde à situação em que um fóton é detectado em cada saída do divisor de feixe (caminhos distintos). Apenas neste caso isso ocorre e foi esse fato que permitiu a medição do estado de Bell $|\Psi^-\rangle$ no experimento de 1997 [8].

4.4.5 Interpretação Física e Medida de Bell Parcial

A análise dos quatro casos revela a limitação fundamental da óptica linear:

- **Casos $|\Phi^\pm\rangle$:** Ambos produzem *bunching* (dois fótons no mesmo modo de saída) com polarizações **iguais**. Não é possível distingui-los apenas pela contagem de fótons e polarização nos detectores. Estes eventos não permitem identificar univocamente o estado de Bell medido.
- **Caso $|\Psi^+\rangle$:** Produz dois fótons no mesmo modo de saída, porém com polarizações **diferentes** (um *H* e um *V*).
- **Caso $|\Psi^-\rangle$:** Produz um fóton em cada saída do divisor de feixe (um fóton no detector 1 e um no detector 2).

A assinatura experimental típica é:

- Detecção de coincidências (um fóton em cada detector) $\rightarrow$ projeta sobre $|\Psi^-\rangle$.

- Detecção de dois fótons em um único detector com polarizações ortogonais
→ projeta sobre $|\Psi^+\rangle$.

Os casos $|\Phi^\pm\rangle$ são indistinguíveis entre si em experimentos que fazem uso do divisor de feixe.

4.4.6 Estado Total Após o Beam Splitter

O estado completo após a ação do divisor de feixe é:

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{2} \left[BS|\Phi^+\rangle \otimes (\alpha|V\rangle + \beta|H\rangle) + BS|\Phi^-\rangle \otimes (\alpha|V\rangle - \beta|H\rangle) \right. \\ \left. + BS|\Psi^+\rangle \otimes (\alpha|H\rangle + \beta|V\rangle) + BS|\Psi^-\rangle \otimes (\alpha|H\rangle - \beta|V\rangle) \right]. \quad (4.68)$$

Substituindo as expressões para $BS|\Phi^\pm\rangle, BS|\Psi^\pm\rangle$ e agrupando os termos, obtemos:

$$|\psi'\rangle = \frac{i\alpha}{2} |2_V\rangle_a |0\rangle_b |1_H\rangle_B - \frac{i\beta}{2} |2_H\rangle_a |0\rangle_b |1_V\rangle_B \\ + \frac{i\alpha}{2} |0\rangle_a |2_V\rangle_b |1_H\rangle_B - \frac{i\beta}{2} |0\rangle_a |2_H\rangle_b |1_V\rangle_B \\ - \frac{i}{2\sqrt{2}} |1_V, 1_H\rangle_a |0\rangle_b (\alpha|1_V\rangle_B - \beta|1_H\rangle_B) \\ - \frac{i}{2\sqrt{2}} |0\rangle_a |1_V, 1_H\rangle_b (\alpha|1_V\rangle_B - \beta|1_H\rangle_B) \\ - \frac{1}{2\sqrt{2}} |1_V\rangle_a |1_H\rangle_b (\alpha|1_V\rangle_B + \beta|1_H\rangle_B) \\ + \frac{1}{2\sqrt{2}} |1_H\rangle_a |1_V\rangle_b (\alpha|1_V\rangle_B + \beta|1_H\rangle_B). \quad (4.69)$$

A Eq. (4.69) representa o estado dos três fótons após os dois fótons com Alice atravessarem o divisor de feixe. O subíndice “B” representa o fóton com Bob.

4.4.7 Probabilidades e Eficiência do Protocolo

Observando a Eq. (4.69), existem oito possibilidades de detecção relevantes. Os quatro termos correspondentes aos estados $|\Phi^\pm\rangle$ (dois fótons no mesmo caminho com mesma polarização) ocorrem com probabilidade total de $1/2$. Nestes casos, o protocolo **não funciona**. Detectar dois fótons com mesma polarização no mesmo caminho pode corresponder tanto a $|\Phi^+\rangle$ quanto a $|\Phi^-\rangle$. Com isso, os estados com Bob nestes cenários não podem ser corrigidos por transformações unitárias para nos dar $\alpha|1_V\rangle_B + \beta|1_H\rangle_B = \alpha|V\rangle_B + \beta|H\rangle_B$, o estado do qubit original teleportado por Alice.

Os quatro termos restantes correspondem a detectar $|\Psi^\pm\rangle$. Eles ocorrem com probabilidade total de $1/2$. Nestes casos, o teletransporte é bem-sucedido após comunicação clássica e a correção unitária feita por Bob:

- Medida de $|\Psi^-\rangle$ (um fóton em cada detector): Bob já possui o estado desejado (fase global irrelevante).
- Medida de $|\Psi^+\rangle$ (dois fótons com polarizações diferentes no mesmo detector): Bob deve aplicar σ_z .

No experimento pioneiro do grupo de Zeilinger [8], não era possível identificar a polarização dos fótons quando dois deles chegavam no mesmo detector. Portanto, apenas o caso $|\Psi^-\rangle$ (coincidências entre detectores) era identificável, correspondendo a uma taxa de sucesso de 25%. Para atingir o limite teórico de 50% com óptica linear, é necessário distinguir se dois fótons no mesmo modo/caminho/detector possuem polarizações iguais ou diferentes. Por exemplo, precisamos utilizar detectores que são capazes de medir o número exato de fótons bem como suas polarizações.

Veja a Tabela 4.1 para um resumo dos casos em que temos sucesso e fracasso ao realizar medidas de Bell usando apenas um divisor de feixe.

Medida	Assinatura experimental	Protocolo funciona?
$ \Phi^+\rangle$	2 fótons no mesmo detector; mesma polarização	Não (indistinguível de $BS \Phi^-\rangle$)
$ \Phi^-\rangle$	2 fótons no mesmo detector; mesma polarização	Não (indistinguível de $BS \Phi^+\rangle$)
$ \Psi^+\rangle$	2 fótons no mesmo detector; polarizações diferentes	Sim (necessária correção σ_z)
$ \Psi^-\rangle$	1 fóton em cada detector; polarizações diferentes	Sim (sem correção)

Tabela 4.1: Resumo das quatro medidas parciais de Bell com divisor de feixe.

4.5 Correções unitárias de Bob

Como vimos anteriormente, após a medição de Bell realizada por Alice e após ser informado sobre o resultado dessa medida, Bob necessita aplicar uma **correção unitária** ao seu qubit para finalizar o protocolo. São quatro operações distintas que ele deve saber implementar, a depender do estado de Bell medido por Alice:

$$I, \quad \sigma_x, \quad \sigma_z, \quad \sigma_z \sigma_x, \quad (4.70)$$

onde σ_x e σ_z são as portas de Pauli X e Z , respectivamente. Além disso, I representa a operação identidade, isto é, Bob não precisa fazer nada caso um certo estado de Bell seja medido por Alice.

Nosso objetivo nesta seção é mostrar como essas correções são implementadas experimentalmente quando lidamos com estados de polarização de fótons para codificar os qubits. Veremos que por meio de **placas de meia onda** [(*half-wave plates* (HWP))] podemos implementar as portas X e Z .

4.5.1 Qubits fotônicos e as portas lógicas X e Z

Conforme já discutido na seção anterior, utilizamos estados de polarização de fótons para codificar nosso qubit. Isto é,

$$|0\rangle \equiv |V\rangle \quad \text{e} \quad |1\rangle \equiv |H\rangle, \quad (4.71)$$

onde $|H\rangle$ representa um fóton com polarização horizontal e $|V\rangle$ um fóton com polarização vertical.

Um estado arbitrário descrevendo a polarização de um fóton pode ser escrito como:

$$|\psi\rangle = \alpha |V\rangle + \beta |H\rangle, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (4.72)$$

Ou seja, podemos ter uma superposição coerente entre os estados $|V\rangle$ e $|H\rangle$, os quais constituem uma base no espaço vetorial complexo de dimensão dois.

Na base computacional $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, a representação matricial das portas de Pauli são:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.73)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.74)$$

A porta σ_x troca os estados da base computacional:

$$\sigma_x |0\rangle = |1\rangle, \quad \sigma_x |1\rangle = |0\rangle. \quad (4.75)$$

Na notação de estados de polarização de fótons:

$$\boxed{\sigma_x |V\rangle = |H\rangle, \quad \sigma_x |H\rangle = |V\rangle.} \quad (4.76)$$

Por sua vez, a porta σ_z inverte o sinal de estado $|1\rangle$:

$$\sigma_z |0\rangle = |0\rangle, \quad \sigma_z |1\rangle = -|1\rangle. \quad (4.77)$$

Ou equivalentemente,

$$\boxed{\sigma_z |V\rangle = |V\rangle, \quad \sigma_z |H\rangle = -|H\rangle.} \quad (4.78)$$

4.5.2 Placas de meia onda e as portas X e Z

Uma **placa de meia onda** (HWP) é um componente óptico birrefringente que introduz uma diferença de fase de exatamente 180° (π radianos) entre o “eixo rápido” e o “eixo lento”, os quais correspondem a duas direções ortogonais. Essa diferença de fase equivale a um atraso de meio comprimento de onda entre um eixo e outro.

Quando a luz polarizada incide na placa de meia onda, podemos analisar o que ocorre com a direção da polarização da luz decompondo seu vetor polarização em duas componentes vetoriais: uma projetada sobre o eixo rápido e outra sobre o eixo lento. Como os índices de refração são diferentes para luz polarizada ao longo dos eixos rápido e lento, uma componente viaja mais rápido (eixo rápido) e a outra mais devagar (eixo lento). Assim, fabricando uma placa de meia onda com uma espessura sob medida para uma determinada cor específica (comprimento de onda), podemos obter um atraso de fase de π radianos entre uma componente e outra.

Matematicamente, modelamos a ação da placa de meia onda utilizando a notação introduzida na Sec. 4.2 para representar um feixe de luz monocromático (comprimento de onda λ e frequência ν bem definidos). O campo elétrico de um feixe de luz monocromático, propagando-se na direção z e com polarização orientada na direção $\hat{n}$ pode ser assim representado [10],

$$\vec{E} = E_0 \cos(kz - \omega t) \hat{n}. \quad (4.79)$$

Aqui, E_0 é a amplitude do campo elétrico (seu máximo valor), $k = 2\pi/\lambda$ e $\omega = 2\pi\nu$. Além disso, como a direção de propagação da luz é sempre ortogonal a sua polarização [10], então $\hat{n}$ é um vetor que pertence ao plano xy .

Se o vetor polarização $\hat{n}$ estiver na mesma direção do eixo rápido da placa de meia onda ($\hat{n} //$ eixo rápido), temos o seguinte campo elétrico do outro lado da placa,

$$\vec{E} = E_0 \cos(kz - \omega t) \hat{n} \longrightarrow \vec{E}' = E_0 \cos(kz - \omega t + \varphi) \hat{n}. \quad (4.80)$$

Aqui φ é o atraso de fase devido a luz se propagar a uma velocidade diferente da velocidade da luz no vácuo ao atravessar o cristal. Caso a luz não encontrasse a placa de meia onda, teríamos $\varphi = 0$.

Por outro lado, se o vetor polarização $\hat{n}$ estiver na mesma direção do eixo lento da placa de meia onda ($\hat{n} //$ eixo lento), temos o seguinte campo elétrico do outro lado da placa,

$$\vec{E} = E_0 \cos(kz - \omega t) \hat{n} \longrightarrow \vec{E}'' = E_0 \cos(kz - \omega t + \varphi + \pi) \hat{n}. \quad (4.81)$$

Agora, além de φ temos mais um atraso de π radianos, devido a velocidade de propagação da luz ao longo do eixo lento ser ainda mais devagar do que ao longo do eixo rápido.

Usando a representação complexa [10], temos para os dois casos:

$$\vec{E} = E_0 e^{i(kz - \omega t)} \hat{n} \longrightarrow \vec{E}' = E_0 e^{i(kz - \omega t + \varphi)} \hat{n}, \quad \hat{n} // \text{ eixo rápido}, \quad (4.82)$$

$$\vec{E} = E_0 e^{i(kz - \omega t)} \hat{n} \longrightarrow \vec{E}'' = E_0 e^{i(kz - \omega t + \varphi + \pi)} \hat{n}, \quad \hat{n} // \text{ eixo lento}. \quad (4.83)$$

Como uma fase global comum não afeta os estados quânticos, podemos suprimir $e^{i\varphi}$ (ou simplesmente definir $\varphi = 0$). E como $e^{i(kz-\omega t+\pi)} = e^{i(kz-\omega t)}e^{i\pi} = -e^{i(kz-\omega t)}$, verificamos que **ao longo do eixo lento temos efetivamente um sinal negativo**. No caso em que $\varphi = 0$, fisicamente isso corresponde a um vetor polarização apontando na direção oposta àquela que ele apontaria caso não houvesse a placa de meia onda ao longo do caminho.

Dessa forma, se convencionamos que o eixo rápido corresponde à direção vertical (eixo y) e o eixo lento à direção horizontal (eixo x), temos, pois, após a placa de meia onda:

$$|V\rangle \longrightarrow |V\rangle, \quad \hat{n} // \text{eixo rápido}, \quad (4.84)$$

$$|H\rangle \longrightarrow -|H\rangle, \quad \hat{n} // \text{eixo lento}. \quad (4.85)$$

As duas últimas equações correspondem exatamente à ação da porta Z nos estados-base $\{|V\rangle, |H\rangle\}$. Portanto, pelo princípio da superposição, ao enviarmos um estado arbitrário a uma placa de meia onda com seu eixo rápido alinhado com a direção vertical temos do outro lado da placa:

$$|\psi\rangle = \alpha |V\rangle + \beta |H\rangle \longrightarrow \alpha |V\rangle - \beta |H\rangle. \quad (4.86)$$

A Eq. (4.86) é o comportamento esperado da ação da porta Z (ou σ_z) sobre um estado arbitrário. Ou seja, provamos o seguinte resultado:

A porta de Pauli σ_z é implementada por uma placa de meia onda com seu eixo rápido orientado na direção vertical.

Vejam os que ocorre, agora, se a placa de meia onda tem seu eixo rápido girado de 45° ($\pi/4$ radianos) no sentido horário. Para descobrir como a polarização vertical (horizontal) é alterada, precisamos calcular suas componentes na direção do eixo rápido e lento. Se $\hat{r}$ e $\hat{l}$ são os versores que dão as direções dos eixos rápido e lento e se $\hat{n}_v$ ($\hat{n}_h$) representa o versor da direção vertical (horizontal), temos (veja a Fig. 4.3):

$$\hat{n}_v = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{r} - \hat{l}), \quad (4.87)$$

$$\hat{n}_h = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{r} + \hat{l}). \quad (4.88)$$

Como a componente da polarização na direção do eixo lento adquire um sinal menos, após a placa de meia onda obtemos:

$$\hat{n}_v \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{r} + \hat{l}) = \hat{n}_h, \quad (4.89)$$

$$\hat{n}_h \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{r} - \hat{l}) = \hat{n}_v. \quad (4.90)$$

Isto é, uma polarização vertical torna-se horizontal e vice-versa.

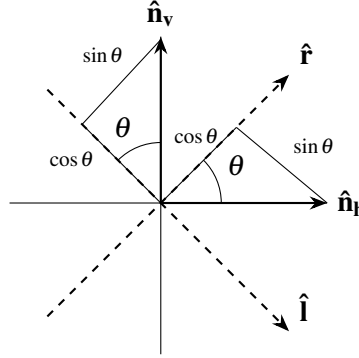


Figura 4.3: Um vetor de módulo um apontando na direção vertical $\hat{n}_v$ tem componentes $\sin \theta$ na direção $\hat{f}$ e $-\cos \theta$ na direção $\hat{i}$. Isto é, $\hat{n}_v = \sin \theta \hat{f} - \cos \theta \hat{i}$. E como $\cos \theta = \sin \theta = 1/\sqrt{2}$ se $\theta = 45^\circ$, temos que $\hat{n}_v = (\hat{f} - \hat{i})/\sqrt{2}$. Analogamente, um vetor de módulo um apontando na direção horizontal $\hat{n}_h$ tem componentes $\cos \theta$ na direção $\hat{f}$ e $\sin \theta$ na direção $\hat{i}$. Logo, para $\theta = 45^\circ$ temos $\hat{n}_h = (\hat{f} + \hat{i})/\sqrt{2}$.

Na notação de estados quânticos temos

$$|V\rangle \longrightarrow |H\rangle, \quad \hat{n}_v \text{ a } 45^\circ \text{ com o eixo rápido}, \quad (4.91)$$

$$|H\rangle \longrightarrow |V\rangle, \quad \hat{n}_h \text{ a } -45^\circ \text{ com o eixo rápido}. \quad (4.92)$$

Note que estamos tomando o eixo rápido como referência, a partir do qual medimos o ângulo. E usamos a convenção de que um ângulo positivo é medido no sentido anti-horário e um ângulo negativo é medido no sentido horário.

As duas últimas equações correspondem à ação da porta X nos estados-base $\{|V\rangle, |H\rangle\}$. Logo, pelo princípio da superposição, ao enviarmos um estado arbitrário a uma placa de meia onda com seu eixo rápido girado no sentido horário de 45° em relação à direção vertical, temos, do outro lado da placa,

$$|\psi\rangle = \alpha |V\rangle + \beta |H\rangle \longrightarrow \alpha |H\rangle + \beta |V\rangle. \quad (4.93)$$

A Eq. (4.93) é o comportamento esperado da ação da porta X (ou σ_x) sobre um estado arbitrário de polarização de um fóton. Ou seja, provamos o seguinte resultado:

A porta de Pauli σ_x é implementada por uma placa de meia onda com seu eixo rápido formando um ângulo de 45° com relação à direção vertical.

Para implementarmos a porta ZX (ou $\sigma_z \sigma_x$) basta usarmos duas placas de meia onda. A primeira delas, com o eixo rápido formando 45° com a vertical, implementa a porta X e, em seguida, o fóton passa por uma placa de meia onda com eixo rápido coincidindo com a direção vertical. Esta última placa implementa a porta Z .

A Fig. 4.4 retrata detalhadamente todas as etapas do experimento do teletransporte quântico realizado em 1997 [8]. Em particular, representamos exatamente

onde ocorre a medida de Bell via um divisor de feixe e também onde se deve implementar as correções unitárias por meio de uma placa de meia onda.

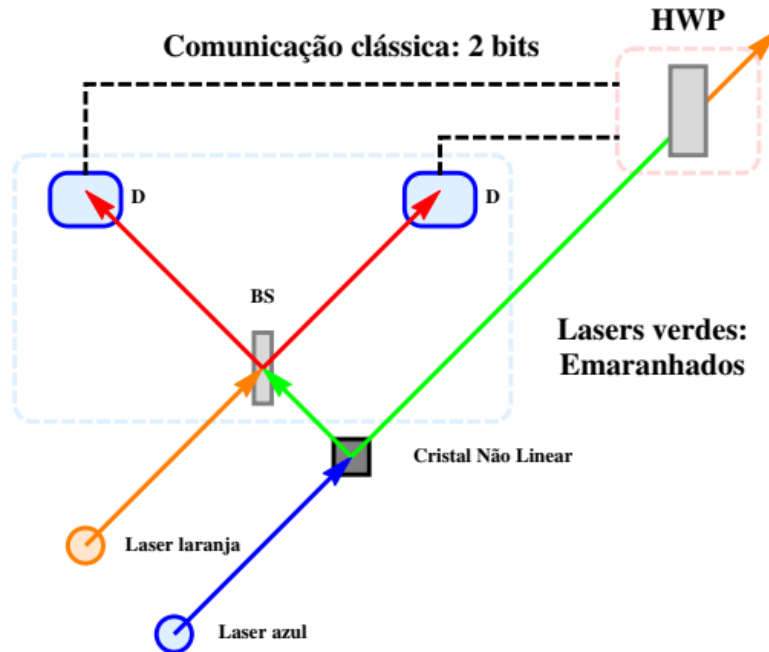


Figura 4.4: Representação esquemática da primeira realização experimental do protocolo de teletransporte. A notação e o significado dos elementos vistos nesta figura são os mesmos da Fig. 4.1. Agora, no entanto, detalhamos como ocorrem a medida de Bell e a correção do qubit com Bob. O fóton que será teleportado (laser laranja) e um dos fótons do par emaranhado (feixe verde à esquerda) incidem num divisor de feixe [beam splitter (BS)]. Se os dois fótons que emergem do outro lado seguem caminhos distintos, sendo detectados pelos detectores D, isso significa que medimos o estado de Bell $|\Psi^-\rangle$. No topo, à direita da figura, vemos um placa de meia onda [half wave plate (HWP)], representando uma das possíveis correções unitárias que Bob deve implementar em seu fóton. Figura e legenda extraídas da Ref. [9].

Capítulo 5

Conclusão

A mecânica quântica constitui uma das teorias mais bem-sucedidas da Física moderna, embora seus conceitos frequentemente apresentem elevado grau de abstração e complexidade matemática. Nesse contexto, este trabalho teve como principal objetivo tornar acessíveis alguns dos fundamentos da teoria da informação quântica para estudantes do ensino médio, utilizando como tema central o protocolo de teletransporte quântico em sistemas de dois níveis, conhecidos como qubits.

Inicialmente, foram apresentados os conceitos fundamentais necessários para a compreensão do fenômeno, incluindo a descrição matemática dos estados quânticos, o formalismo de vetores de estado, o princípio da superposição e o fenômeno do emaranhamento quântico.

Posteriormente, foi analisado o protocolo de teletransporte quântico, demonstrando-se como um estado quântico arbitrário pode ser “teleportado” de um local a outro utilizando um canal clássico de comunicação e um par de partículas previamente emaranhadas. A descrição matemática do protocolo evidenciou o papel fundamental das medidas na base de Bell e das correções unitárias realizadas pelo receptor para a reconstrução do estado original.

Além disso, foram discutidos elementos experimentais relevantes para a implementação de protocolos de informação quântica, tais como divisores de feixe, interferência quântica e o efeito Hong-Ou-Mandel. Esses fenômenos ilustram como princípios fundamentais da mecânica quântica podem ser observados e explorados em sistemas físicos reais.

Os resultados apresentados demonstram que, apesar da sofisticação matemática envolvida, é possível introduzir conceitos avançados da informação quântica de forma gradual e acessível. Dessa maneira, o trabalho contribui para a divulgação científica e para o despertar do interesse de estudantes por áreas contemporâneas da Física, especialmente aquelas relacionadas à computação quântica, criptografia quântica e tecnologias emergentes baseadas em fenômenos quânticos.

Por fim, espera-se que este estudo sirva como material introdutório para futuras investigações sobre informação quântica, incentivando o aprofundamento em tópicos mais avançados e contribuindo para a formação de novos pesquisadores interessados na compreensão dos fundamentos e das aplicações da mecânica quântica.

Referências Bibliográficas

- [1] R. Shankar, Principles of Quantum Mechanics (Plenum Press, New York, 1980).
- [2] G. Benenti, G. Casati e G. Strini, Principles of Quantum Computation and Information, Vol. 1: Basic Concepts (World Scientific, Singapore, 2004).
- [3] C. H. Bennett e G. Brassard, Quantum cryptography: Public key distribution and coin tossing. In Proceedings of IEEE International Conference on Computers, Systems and Signal Processing, pags. 175-179, IEEE, New York, 1984. Bangalore, India, Dezembro de 1984.
- [4] D. Deutsch e R. Jozsa, Rapid solution of problems by quantum computation, Proc. R. Soc. London A **439**, 553 (1992).
- [5] P. W. Shor, Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring. In Proceedings, 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science, IEEE Press, Los Alamitos, CA, 1994.
- [6] C. H. Bennett and S. J. Wiesner, Communication via one- and two-particle operators on Einstein-Podolsky-Rosen states, Phys. Rev. Lett. **69**, 2881 (1992).
- [7] C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crepeau, R. Jozsa, A. Peres, and W.K. Wootters, Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels, Phys. Rev. Lett. **70**, 1895 (1993).
- [8] D. Bouwmeester, J.-W. Pan, K. Mattle, M. Eibl, H. Weinfurter, and A. Zeilinger, Experimental quantum teleportation, Nature (London) **390**, 575 (1997).
- [9] C. C. C. dos Santos e G. Rigolin, Tomografia de estados quânticos e o teletransporte: dois lados da mesma moeda, artigo submetido para publicação.
- [10] D. J. Griffiths, Introduction to Electrodynamics, (Prentice Hall, New Jersey, 1999).



GATOS INSTÁVEIS

Da evolução estelar à relatividade: a formação e a
descrição dos buracos negros

Eduardo Henrique Fabiane

Rafael Araújo de Oliveira

Orientador: Prof. Dr. André Gustavo Scagliusi Landulfo

Universidade Federal do ABC

ESCOLA DE TALENTOS - TURMA GATOS INSTÁVEIS
INSTITUTO PRINCIPIA

**Da Evolução Estelar à Relatividade: a formação e a descrição dos buracos
negros**

AUTORES: EDUARDO HENRIQUE FABIANE
RAFAEL ARAÚJO DE OLIVEIRA
ORIENTADOR: ANDRÉ GUSTAVO SCAGLIUSI LANDULFO

São Paulo - SP
Julho, 2026

AGRADECIMENTOS

Eduardo

Agradeço primeiramente a Deus, por me guiar e me dar forças ao longo de toda esta caminhada.

À minha família, pelo apoio incondicional e por sempre acreditarem em mim durante toda esta jornada.

Aos professores Ricardo Matheus, Leonardo de Lima e André Paschoal, que conduziram as aulas ao longo do projeto, sempre dispostos a enriquecer nosso conhecimento e a nos guiar da melhor forma possível.

Ao Marcelo Guzzo, que sempre procurou fazer o possível para que nossa trajetória na Escola de Talentos fosse leve e para que pudéssemos estudar aquilo que gostamos.

Em especial, ao meu orientador, André Landulfo, que ao longo deste período se dispôs a ajudar a mim e ao Rafael neste trabalho de conclusão de curso, sempre nos ensinando de maneira calma, clara e atenciosa às nossas dúvidas e preocupações.

À Mariana, por toda a atenção e cuidado durante nossos encontros, levantando de madrugada pra deixar eu olhar pelo telescópio.

Ao Wellington, por toda a ajuda e dedicação para que tudo ocorresse da melhor forma.

Ao Instituto Principia, que, por meio da Escola de Talentos, tornou possível a realização deste projeto, o qual foi e será um aprendizado enriquecedor para muitos alunos.

Rafael

Agradeço primeiramente a Deus, por me guiar e me dar forças ao longo de toda esta caminhada.

À minha família, pelo apoio constante e por me incentivarem a seguir em frente em cada etapa desta jornada.

Aos professores Ricardo Matheus, Leonardo de Lima e André Paschoal, que conduziram as aulas ao longo do projeto, sempre dispostos a enriquecer nosso conhecimento e a nos guiar da melhor forma possível.

Ao Marcelo Guzzo, que sempre procurou fazer o possível para que nossa trajetória na Escola de Talentos fosse leve e para que pudéssemos estudar aquilo que gostamos.

Em especial, ao meu orientador, André Landulfo, que ao longo deste período se dispôs a ajudar a mim e ao Eduardo neste trabalho de conclusão de curso, sempre nos ensinando de maneira calma, clara e atenciosa às nossas dúvidas e preocupações.

Ao Wellington, por toda a ajuda e dedicação para que tudo ocorresse da melhor forma.

Ao Instituto Principia, que, por meio da Escola de Talentos, tornou possível a realização deste projeto, o qual foi e será um aprendizado enriquecedor para muitos alunos.

RESUMO

Este trabalho apresenta uma abordagem sobre a evolução das estrelas e os fenômenos físicos associados aos buracos negros, articulando a descrição astrofísica com o tratamento relativístico do espaço-tempo. Inicialmente, é discutido o ciclo de vida estelar de forma conceitual, desde a formação das estrelas a partir de nuvens moleculares, passando pela sequência principal, a fase de estabilidade em que ocorre a fusão do hidrogênio, até seus estágios finais. Demonstra-se que a massa é o fator determinante do destino de cada estrela, que pode terminar como anã branca, estrela de nêutrons ou buraco negro. Em seguida, o trabalho aborda os fundamentos da teoria da relatividade, desde a relatividade especial e o espaço-tempo de Minkowski até a relatividade geral e as equações de Einstein, apresentando as soluções de Schwarzschild e de Kerr. A partir dessas formulações, analisam-se as propriedades dos buracos negros, incluindo o horizonte de eventos, o raio de Schwarzschild e, no caso dos buracos negros rotacionais, a ergosfera. Por fim, discute-se a radiação Hawking, fenômeno que conecta a relatividade geral, a mecânica quântica e a termodinâmica. Conclui-se que o estudo da evolução estelar e da relatividade, de forma integrada, permite compreender tanto a origem quanto a natureza física dos buracos negros.

Palavras-chave: Evolução estelar. Buracos negros. Relatividade geral. Radiação Hawking. Métrica de Schwarzschild.

ABSTRACT

\This study presents an approach to stellar evolution and the physical phenomena associated with black holes, connecting the astrophysical description with the relativistic treatment of spacetime. Initially, the stellar life cycle is discussed conceptually, from the formation of stars from molecular clouds, through the main sequence, the stable phase in which hydrogen fusion occurs, to their final stages. It is shown that mass is the determining factor in the fate of each star, which may end as a white dwarf, a neutron star, or a black hole. Next, the study addresses the foundations of the theory of relativity, from special relativity and Minkowski spacetime to general relativity and Einstein's equations, presenting the Schwarzschild and Kerr solutions. Based on these formulations, the properties of black holes are analyzed, including the event horizon, the Schwarzschild radius, and, in the case of rotating black holes, the ergosphere. Finally, Hawking radiation is discussed as a phenomenon that connects general relativity, quantum mechanics, and thermodynamics. It is concluded that the integrated study of stellar evolution and relativity makes it possible to understand both the origin and the physical nature of black holes.

Keywords: stellar evolution; black holes; general relativity; Hawking radiation; Schwarzschild metric.

SUMÁRIO

Introdução	7
1 Formação Estelar	9
2 Formação e Fases Pré-Sequência Principal	11
2.1 Protoestrelas.....	11
2.2 Estrelas Jovens (T-Tauri).....	12
2.3 Anãs Marrons	14
3 Sequência Principal.....	15
3.1 O Início da Fusão	15
3.2 Massa e Tempo de Vida	16
4 O Fim da Vida das Estrelas.....	17
4.1 Saída da Sequência Principal.....	17
4.2 Gigante Vermelha e Anã Branca	17
4.3 Explosão de Supernova.....	20
4.4 Estrelas de Nêutrons	22
5 Buracos Negros.....	25
5.1 Formação de Buracos Negros	25
5.2 Horizonte de Eventos.....	25
5.3 A Radiação Hawking.....	25
6 Relatividade Especial e seus Fundamentos.....	27
6.1 Limitações da Mecânica Clássica	27
6.2 Postulados da Relatividade Especial	28
6.3 Dilatação Temporal, Contração Espacial e o Fator de Lorentz.....	28
6.4 Transformações de Lorentz	29
7 Espaço-Tempo de Minkowski.....	31
7.1 Eventos e Representação Espaço-Temporal	31
7.2 Diagramas de Espaço-Tempo	31

7.3 O Intervalo Invariante Espaço-Temporal e a Métrica.....	32
7.4 Cones de Luz e Causalidade.....	33
8 Espaço-Tempo de Rindler e Princípio de Equivalência.....	34
8.1 Espaço-Tempo de Rindler	34
8.2 Princípio da Equivalência.....	34
8.3 As Equações de Einstein	35
9 A Energia, a Quadrivelocidade e o Quadrimomento de uma Partícula	36
9.1 A Solução de Schwarzschild.....	36
9.2 Diagrama de Espaço-Tempo de Schwarzschild e os Cones de Luz	37
10 Métrica de Kerr.....	40
11 Propriedades Gerais dos Buracos Negros	42
11.1 Horizonte de Eventos.....	42
11.2 Singularidade Gravitacional Real.....	42
11.3 Buracos Negros “Não Possuem Cabelo”	42
11.4 Frame Dragging.....	42
11.5 Lei das Áreas	43
REFERÊNCIAS.....	47

Introdução

O estudo das estrelas permite compreender não apenas como esses corpos surgem e se transformam, mas também como dão origem a alguns dos objetos mais extremos do universo. Ao longo de sua existência, uma estrela percorre um ciclo de vida que se inicia na formação a partir de nuvens de gás, passa pela sequência principal — a longa fase de estabilidade em que ela funde hidrogênio — e culmina em seus estágios finais, cujo destino depende diretamente de sua massa: anãs brancas, estrelas de nêutrons ou buracos negros.

Entre esses destinos, os buracos negros se destacam como os mais extremos: regiões do espaço-tempo cuja gravidade é tão intensa que nem mesmo a luz consegue escapar. Compreendê-los plenamente, no entanto, exige ir além da descrição astrofísica de sua formação e recorrer a um novo arcabouço teórico. A partir da visão clássica newtoniana é possível descrever diversos fenômenos físicos observados no cotidiano, especialmente aqueles associados a baixas velocidades e campos gravitacionais pouco intensos. Entretanto, ao analisar fenômenos que ocorrem em regimes de velocidades muito elevadas, próximas à velocidade da luz, ou em regiões onde os efeitos gravitacionais tornam-se significativos, as previsões fornecidas pelo modelo clássico deixam de apresentar resultados compatíveis com observações experimentais.

Nesse contexto surge a teoria da relatividade, inicialmente desenvolvida por Albert Einstein, a qual introduz uma nova interpretação para os conceitos de espaço e tempo. Nessa nova perspectiva, o espaço-tempo deixa de ser apenas o palco onde os fenômenos físicos ocorrem e passa a desempenhar um papel ativo na dinâmica, respondendo à presença da matéria por meio de sua curvatura. A partir dessa formulação, diversas descrições geométricas do espaço-tempo foram propostas, incluindo modelos planos, como o espaço-tempo de Minkowski, referenciais acelerados descritos pelas coordenadas de Rindler e modelos gravitacionais mais gerais, como aqueles desenvolvidos por Einstein, Schwarzschild e Kerr.

Este trabalho tem como objetivo, em um primeiro momento, apresentar o ciclo de vida estelar de forma conceitual, evidenciando como os processos de evolução das estrelas conduzem à formação dos diferentes objetos compactos — em especial os

buracos negros. Em seguida, apresenta a evolução do conceito de espaço-tempo, desde a relatividade especial até a relatividade geral, introduzindo os principais fundamentos físicos e matemáticos necessários para a compreensão desses modelos, incluindo uma análise conceitual dos buracos negros. Articula-se, assim, a descrição astrofísica das estrelas com o tratamento relativístico do espaço-tempo.

1 Formação Estelar

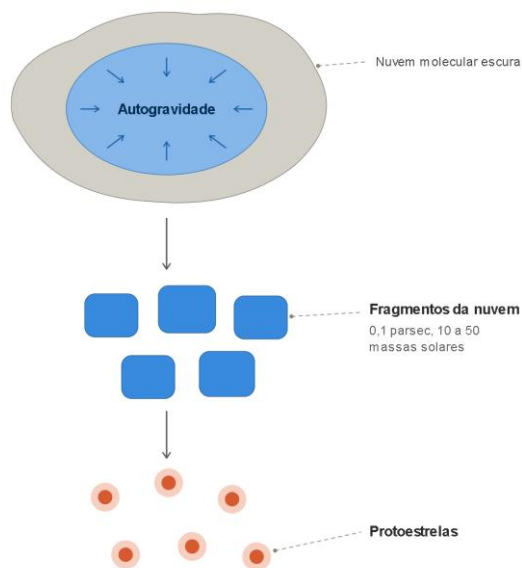
Estrelas são criadas a partir de grandes nuvens de gás e poeira chamadas nuvens moleculares (Maia Gil; Silva Pinho; Fernandes de Fernandes, 2023). Nuvens moleculares possuem massa que pode variar entre mil e dez milhões de vezes a do Sol, com a sua extensão podendo abranger de dezenas até centenas de anos-luz (NASA, 2026). Sua constituição é formada principalmente pelos gases moleculares H_2O , CH_4 , NH_3 e H_2 (Antunes Rosa *et al.*, 2025).

Nuvens moleculares são frias, fazendo com que o gás se aglomere em bolsas de alta densidade (NASA, 2026). Esses locais, por conta de sua alta densidade, impedem a passagem de luz visível, sendo chamadas nebulosas escuras. Para estudar essas regiões, é necessário a utilização do infravermelho ou o domínio de rádio (UFRGS, [s.d.]).

A formação estelar propriamente dita começa quando regiões mais densas das nuvens moleculares colapsam sob a ação de sua própria gravidade. Tais regiões têm as suas massas em torno de 10^4 massas solares. Essas regiões, que geralmente são centralizadas nas nuvens moleculares, têm densidade maior do que em partes mais externas, fazendo com que colapsem primeiro.

Enquanto colapsam, as regiões centrais se fragmentam em pedaços, com cerca de 0,1 parsec de extensão (aproximadamente 0,33 anos-luz) e com massas variando entre 10 e 50 vezes a massa solar. Esses fragmentos dão origem às protoestrelas (o tempo envolvido entre o colapso das regiões centrais e a formação das estrelas é da ordem dos milhões de anos).

Figura 1 – Esquema do colapso de uma nuvem molecular: a autogravidade fragmenta a nuvem, originando as protoestrelas.



Fonte: elaborada pelo autor (2026).

Grande parte das regiões onde estrelas são formadas são fontes infravermelho, indicando a presença de gás em contração e aquecimento, decorrente da conversão de energia potencial gravitacional em energia interna, associada ao movimento e a agitação das partículas que compõem um corpo (UFRGS, [s.d.]).

Lotes de estrelas que se formaram recentemente a partir de nuvens moleculares, são chamados de aglomerados estelares e nuvens moleculares cheias de aglomerados estelares são chamados de viveiros estelares (NASA, 2026).

2 Formação e Fases Pré-Sequência Principal

2.1 Protoestrelas

A protoestrela surge quando um fragmento se destaca das outras partes da região de formação estelar, tornando-se um objeto bem definido, seu campo gravitacional se destaca do restante da nuvem. Como dito anteriormente, durante a formação da protoestrela, gás cai em direção ao seu centro se contraindo e convertendo energia cinética em energia interna. Esse processo leva ao aquecimento e ao aumento da pressão do corpo, que ao atingir alguns milhares de graus, a protoestrela se torna uma fonte de infravermelho.

Figura 2 – A protoestrela L1527, envolta na nuvem de material que alimenta seu crescimento, observada no infravermelho pelo Telescópio Espacial James Webb.



Fonte: NASA, ESA, CSA e STScI (2022).

Ainda durante o colapso inicial, ele é rápido e o fragmento permite a passagem de radiação de forma fácil. À medida que a densidade aumenta, o fragmento se torna opaco, retendo radiação e consequentemente calor e o aumento da pressão no centro.

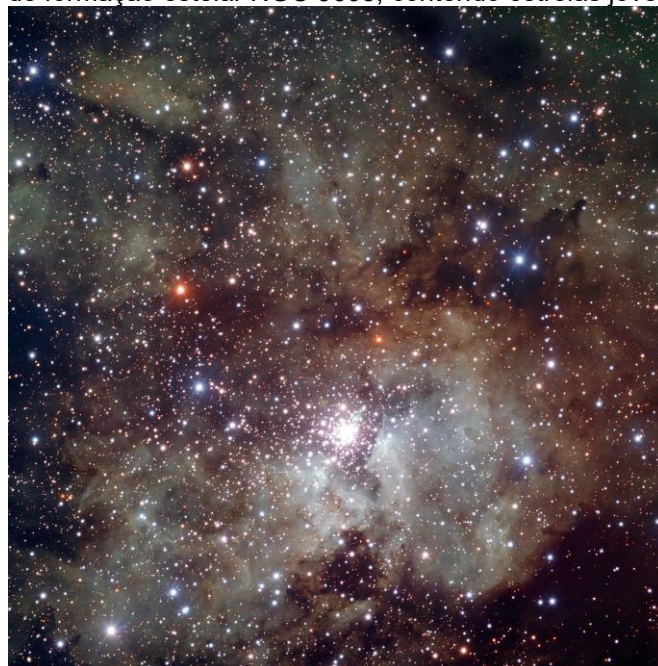
Em algum momento, a pressão se torna grande ao ponto de conter o colapso do objeto, que se torna uma protoestrela estável.

No começo, as protoestrelas têm apenas 1% de sua massa final. O material ainda cai em direção ao centro da protoestrela, acumulando-se em suas regiões mais externas (UFRGS, [s.d.]). Quando ela atinge uma temperatura de oito milhões de kelvin (UFRGS, [s.d.]) após alguns milhões de anos, as reações termonucleares iniciam-se em seu centro. Um forte vento estelar (radiação e partículas) é produzido, finalmente encerrando a queda de gás em direção ao centro. A partir daí a protoestrela se torna uma estrela jovem, pois sua massa não se altera mais, e a sua futura evolução está definida.

2.2 Estrelas Jovens (T-Tauri)

Estrelas quando estão nessa fase inicial, são chamadas de T-Tauri, e elas sempre são encontradas no interior de nuvens de gás das quais nascem (UFRGS, [s.d.]; Gregorio-Hetem *et al.*, 1992). Um exemplo notável é a NGC 3603 (ver Figura 3), uma região de formação estelar localizada a vinte e dois mil anos-luz de distância da terra, considerada uma das mais compactas e luminosas estrelas jovens de grande massa de toda a Via Láctea (ESO, 2010)

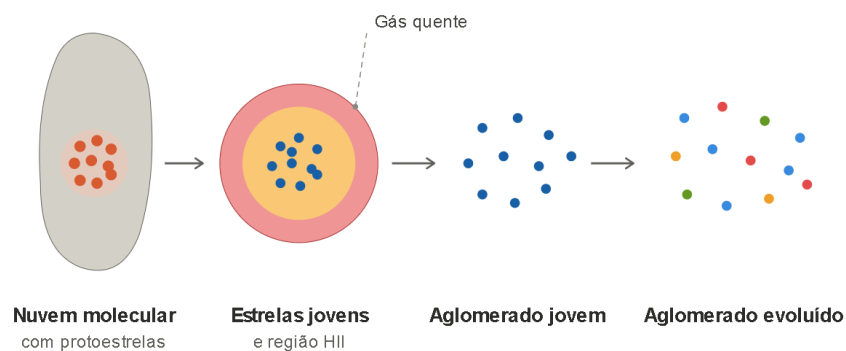
Figura 3 – A região de formação estelar NGC 3603, contendo estrelas jovens de grande massa.



Fonte: ESO, 2010.

As estrelas jovens evoluem a partir de um aglomerado de protoestrelas localizadas em regiões centrais das nuvens moleculares. Elas evoluem juntas, pois a nuvem se fragmenta em vários pedaços simultaneamente. Essas protoestrelas se tornam um aglomerado de estrelas T-Tauri, cuja superfície quente e ventos estelares aquecem o gás à sua volta e formam uma região denominada HII — processo decorrente da ionização do hidrogênio ao redor, por conta da abundância de radiação ultravioleta que as estrelas jovens emitem. Posteriormente, esses aglomerados se quebram e o gás é expelido, o que marca a evolução para as estrelas. Essa expulsão de gás é decorrente da imensa força dos ventos estelares. O esquema abaixo ilustra a evolução.

Figura 4 – Evolução de um aglomerado estelar, da nuvem molecular ao aglomerado evoluído.



Fonte: adaptada de UFRGS ([s.d.]).

É comum achar aglomerados de estrelas jovens próximas a outras estrelas jovens. Isso ocorre decorrente da formação estelar induzida por supernovas. Estrelas muito massivas são as primeiras a se formar no interior de uma nuvem e terminam a sua vida como supernovas. A explosão da supernova no interior da nuvem gera ondas de choque, que comprimem o gás próximo e levando-o a formar estrelas novas. Esse fenômeno leva a uma formação coerente de estrelas (estrelas jovens encontradas próximas a outras estrelas jovens), isso é o motivo do padrão de distribuição coerente de estrelas, visto em várias galáxias. A figura abaixo demonstra esse processo, onde (a), (b) e (c) são processos sucessivos da formação estelar induzida (UFRGS, [s.d.]).

2.3 Anãs Marrons

Em casos em que uma protoestrela se forma com 8% ou menos da massa solar, sua temperatura central nunca atinge a temperatura dos oito milhões de kelvin, e a fusão nuclear não é iniciada. Esta estrela "mal-sucedida" é chamada de anã marrom. Ela é um objeto intermediário entre uma estrela e um planeta como Júpiter (Rebolo; Zapatero Osorio; Martín, 1995).

Mesmo que não ocorra reações de fusão nuclear em seus interiores, anãs marrons emitem luz, principalmente no infravermelho, devido a energia que se acumula durante o colapso do gás em sua formação. Ela tem energia para brilhar por cerca de 15 milhões de anos. A importância das anãs marrons na astronomia está na sua abundância, por ser o tipo mais comum de estrelas, constituindo grande parte da matéria da nossa e das outras galáxias. Decorrido os 15 milhões de anos, elas esfriam, se tornam invisíveis e são chamadas de anãs pretas (UFRGS, [s.d.]).

3 Sequência Principal

Como visto anteriormente, ao final da fase proto estelar o núcleo se encontra cada vez mais denso e quente, porém, esse aquecimento não decorre de reações nucleares, mas sim da contração gravitacional. Também foi visto que essa fonte de energia é passageira, durando cerca de 15 milhões de anos, para sobreviver por bilhões de anos, como o Sol, a estrela precisa repor sua energia de outra forma. A mudança ocorre quando o seu núcleo atinge a temperatura de 8 milhões de kelvin. A partir daí se iniciam as reações termonucleares de fusão do hidrogênio, com a protoestrela se tornando uma estrela. A energia que a fusão nuclear fornece, substitui a contração gravitacional como forma de sustentação, e é aí que a forma mais longa da vida estelar começa: **a sequência principal**.

A sequência principal, nada mais é do que a fase “madura” da estrela. Nessa fase, não há mais mudanças de temperatura, massa e diâmetro, se tornando constantes. Quando a estrela chega nessa etapa, a queima de hidrogênio no seu interior é recente. Por exemplo, o Sol passará cerca de 11 bilhões de anos queimando hidrogênio tranquilamente (Gregorio-Hetem; Jatenco-Pereira, 2010).

3.1 O Início da Fusão

A fusão nuclear começa após a estrela atingir os já citados 8 milhões de kelvin, e ela funciona da seguinte maneira: 4 núcleos de hidrogênio se fundem para formar 1 núcleo de hélio. O hidrogênio tem apenas 1 próton em seu núcleo, diferente do hélio que possui 2 prótons e 2 nêutrons, e a massa do núcleo formado é um pouco menor que a soma das massas dos 4 núcleos utilizados. Essa diferença de massa (0,007 da massa inicial) é o que será convertida em energia no interior da estrela (vale notar que, dos 4 prótons iniciais, 2 se convertem em nêutrons ao longo do processo, o que justifica a composição final do hélio. Essa conversão ocorre por meio de um decaimento nuclear que libera outras partículas, mas o detalhamento desse mecanismo foge ao escopo deste trabalho). A estrela tem grande quantidade de combustível a ser queimado, pois 90% de sua constituição são átomos de hidrogênio (Gregorio-Hetem; Jatenco-Pereira, 2010).

3.2 Massa e Tempo de Vida

Para o início da fusão nuclear, os núcleos devem estar extremamente próximos uns dos outros, no entanto por conta de todos terem carga positiva, a repulsão elétrica entre eles impede a aproximação necessária e a fusão não ocorre. Porém no interior de uma protoestrela sofrendo a contração gravitacional, a temperatura aumenta à medida que o objeto colapsa, fazendo com que as partículas atinjam altas velocidades. Dessa maneira, alguns núcleos terão energia necessária para superar a repulsão elétrica, permitindo a interação entre eles.

Quando esses processos termonucleares se estabelecem, eles se autocontrolam. Dessa forma, quando a produção de energia nuclear aumenta, um excesso de pressão é gerado, provocando na estrela uma tendência de se expandir. Com o aumento do tamanho, o gás no interior da estrela tende a se resfriar, fazendo com que a estrela ache temperatura e tamanho ideais para o equilíbrio (o que caracteriza essa fase)(Bandecchi; Bretones; Horvath, 2019).

A massa da estrela e a temperatura em seu interior estão correlacionadas, de forma que uma massa maior resulta em uma temperatura maior. Estrelas mais quentes e mais massivas têm luminosidade superficial alta e consomem o seu combustível de forma muito mais acelerada que estrelas menos massivas, portanto o seu tempo de vida é menor. Como será visto adiante, é também a massa que determinará o destino final da estrela (Gregorio-Hetem; Jatenco-Pereira, 2010).

4 O Fim da Vida das Estrelas

4.1 Saída da Sequência Principal

Como visto anteriormente, a massa da estrela é o fator crucial que determina como será o fim de sua vida (Maia Gil; Silva Pinho; Fernandes de Fernandes, 2023) . A massa está também relacionada à energia que ela tem armazenada, e a taxa que ela gasta essa energia é a sua luminosidade. Há uma relação matemática que prova que massa e luminosidade estão ligadas ao tempo que a estrela permanece na sequência principal (Bandecchi; Bretones; Horvath, 2019); como o foco do trabalho não está na matemática, mas sim na evolução estelar, a relação não será abordada aqui.

Dessa forma, quanto maior a massa, menor o tempo na fase de estabilidade. Há alguns principais exemplos de casos extremos, que são estrelas do tipo O ou B (que são as que possuem a maior massa de todas, podendo atingir respectivamente: 60 e 18 massas solares.), que permanecem na sequência principal por apenas algumas dezenas de milhões de anos, enquanto as do tipo anãs vermelhas (0,3 massas solares) podem ficar por até trilhões de anos queimando hidrogênio.

A massa também determina a fase pós sequência principal da vida de cada estrela, a saída dessa fase apresenta diferentes possibilidades, que levarão a estrela até a sua morte, os estágios finais de evolução. Quando o hidrogênio do núcleo finalmente é fundido em hélio, o longo equilíbrio que a estrela teve se rompe, bem como sua aparência e pressão interna se modificam (Maia Gil; Silva Pinho; Fernandes de Fernandes, 2023; Gregorio-Hetem; Jatenco-Pereira, 2010).

4.2 Gigante Vermelha e Anã Branca

No processo de fusão nuclear, a composição da estrela muda gradualmente, com a transformação do hidrogênio em hélio. No centro da estrela, a temperatura é mais elevada e a quantidade de hélio aumenta mais rapidamente que em outras áreas. À medida que o tempo passa, o núcleo começa a ter cada vez menos quantidade de hidrogênio, até ser nula, com um núcleo composto só de hélio. O processo de produção de energia nuclear termina e a fusão se inicia nas camadas mais acima. Desse modo, o núcleo mais interno de He puro, se torna cada vez maior. Como nesse

caso, o hélio não é fundido, não há produção de radiação e a pressão do gás diminui no núcleo mais interno, porém a gravidade não diminui, fazendo com que haja mudanças na estrutura da estrela, inevitavelmente. Cerca de 10 bilhões de anos após a chegada na sequência principal, no caso de uma estrela como o Sol, o núcleo de hélio começa a sua contração.

Em casos em que ocorre a fusão do hélio em elementos mais pesados, uma nova situação de equilíbrio pode surgir. Há mais energia sendo gerada com a queima do He e a pressão da radiação é suficiente para contrabalancear a contração gravitacional. Como já visto anteriormente, para que ocorra a fusão, são necessárias altas temperaturas, para que seja fornecida bastante energia cinética, suficiente para superar a força de repulsão eletromagnética entre partículas de mesma carga, no caso dos núcleos atômicos, positiva. Como no He há dois prótons no núcleo, a repulsão é maior ainda do que no hidrogênio, fazendo com que temperaturas da ordem dos 10^8 K sejam necessárias (para fundir o núcleo de hidrogênio é necessário pelo menos 10^7 K).

Com o fim da fusão nuclear no interior da estrela, a pressão diminui na região mais interna, causando um aumento na temperatura. Isso faz com que a queima de hidrogênio seja mais intensa, gerando energia de forma mais rápida do que era na sequência principal. Mesmo que a queima tenha cessado no interior da estrela, agora ela brilha mais.

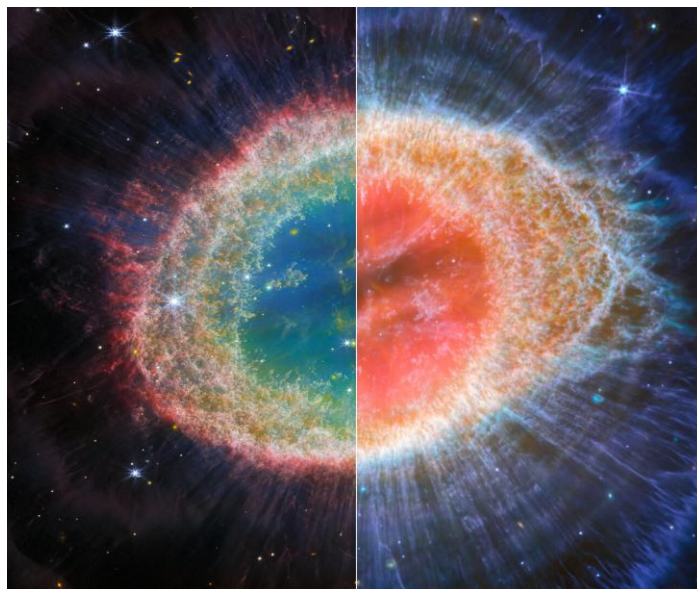
A rápida queima de H causa uma pressão de radiação que impele as camadas mais externas a aumentarem o seu raio. Com a expansão, a temperatura superficial da estrela diminui, e ela começa a se transformar em uma gigante vermelha, processo que dura 100 milhões de anos. Porém, a expansão da gigante vermelha não continua indefinidamente, chega um momento em que o núcleo atinge a pressão e temperatura necessária para a fusão do He. Quando isso ocorre, três núcleos de He se fundem para formar um núcleo de carbono (esse processo recebe o nome de triplo-alfa) (Gregorio-Hetem; Jatenco-Pereira, 2010). Essa ignição acontece de forma abrupta, num evento que é conhecido como flash de hélio, restabelecendo a pressão térmica no núcleo. A partir daí a estrela se equilibra com duas fontes de energia: o hélio se fundindo no núcleo, e o hidrogênio na camada ao seu redor.

Algumas dezenas de milhões de anos depois do flash de He, um novo núcleo estelar foi formado, composto agora, principalmente de carbono. O interior estelar está dividido agora em: núcleo interno de C; camada de He queimando; camada de H queimando; camada de H, onde não há queima. A partir daí a estrela se expande ainda mais, aumentando ainda mais sua luminosidade, sendo nomeada supergigante vermelha.

O núcleo da supergigante vermelha não é quente o suficiente para continuar o processo de fusão e transformar o carbono em elementos mais pesados. Desta forma o núcleo continua a diminuir de tamanho, por conta da força gravitacional. A contração ocorre até que os elétrons fiquem tão próximos de si, que o gás não pode mais ser comprimido - fenômeno chamado degenerescência da matéria (Horvath, 2022). A temperatura, por conta disso, se estabiliza e a energia é produzida apenas nas camadas mais externas, onde a queima de H e He ainda é presente. Com o aumento da radiação vinda dessas camadas, o envoltório da estrela (suas camadas mais externas, de gás que não participa da fusão) se torna instável e acaba sendo ejetado. A estrela agora é dividida em duas componentes: um núcleo central muito pequeno, quente e de alta densidade, com apenas algumas camadas externas onde ocorre a queima de He; o material ejetado, que é frio e difuso, distante do núcleo central, denominado de nebulosa planetária.

Com o passar do tempo, a nebulosa planetária continua o seu processo de expansão, cada vez mais fria e difusa. A remanescente estelar no centro é composta principalmente de carbono, e por conta da sua alta temperatura, continua visível, mas com pouco brilho por ser pequena. Essa estrela restante é muito quente e densa, com o tamanho próximo ao da Terra, e metade da massa do Sol, recebendo o nome de anã branca (Gregorio-Hetem; Jatenco-Pereira, 2010).

Figura 5 – A Nebulosa do Anel (M57), uma nebulosa planetária formada por uma estrela que expeliu suas camadas externas, observada em duas faixas do infravermelho pelo Telescópio Espacial James Webb; no centro, a anã branca remanescente.



Fonte: ESA/Webb, NASA e CSA (2023).

4.3 Explosão de Supernova

Todas as estrelas, após terem o hidrogênio em seu núcleo esgotado, deixam a sequência principal e começam a se expandir. Porém, estrelas com diferentes massas têm caminhos diferentes. Quanto maior a massa menor será a sua densidade interna quando a temperatura de queima de He for atingida, então a pressão gerada pela proximidade dos elétrons será menor também, fazendo com que o núcleo estelar seja mais estável durante a produção de C. Nessa fase, não há eventos explosivos como o flash do He, e não há mudanças repentinas.

Em estrelas com massas acima de oito massas solares, a temperatura interna atinge o necessário para fundir carbono em elementos mais pesados. Nesses casos, o núcleo estelar se desenvolve tão rapidamente, que a queima de He chega antes da estrela se tornar uma gigante vermelha. Ela passa por várias etapas de fusão nuclear, sem sofrer drásticas alterações. Quanto mais se aprofunda nas camadas internas de uma estrela massiva, maiores temperaturas são atingidas e diferentes processos de fusão nuclear acontecem - essa separação por camadas, frequentemente é comparada a uma cebola. Essas diversas camadas, processam cada vez elementos mais pesados, como: oxigênio, neônio, magnésio, silício e ferro, o qual compõe a parte

mais interna do núcleo, sendo o limite de fusão, também (Gregorio-Hetem; Jatenco-Pereira, 2010).

Cada período entre o equilíbrio (período em que há fusão no núcleo) e instabilidade (o combustível daquela etapa acaba), a temperatura central aumenta e as reações nucleares aceleram, e a energia gerada sustenta a estrela contra o colapso gravitacional. Cada vez esse processo se torna mais rápido. Em estrela com vinte massas solares, o silício (um dos últimos elementos a se fundir) queima por apenas uma semana, e o núcleo estelar formado de ferro se desenvolve em menos de um dia.

O átomo de ferro é muito compacto e estável, e a sua fusão para gerar elementos mais pesados não gera energia. Com o fim da geração de energia, não há mais como conter o colapso gravitacional causando uma implosão estelar. A temperatura aumenta para 10^9 K, suficiente para gerar fótons energéticos (raios gama), capazes de quebrar o ferro em elementos mais leves, dividindo-os até restar apenas prótons e nêutrons - esse processo é chamado de fotodesintegração. Para que ocorra a fotodesintegração, é necessário altas energias, e conforme a energia é absorvida, o núcleo estelar se resfria, diminuindo mais ainda a pressão e acarretando num colapso gravitacional acelerado (Gregorio-Hetem; Jatenco-Pereira, 2010).

Com o aumento da densidade, a pressão torna-se tão intensa que os elétrons são forçados a se fundir com os prótons: cada par elétron-próton dá origem a um nêutron e um neutrino. Dessa forma, as partículas eletricamente carregadas vão desaparecendo, e a matéria transforma-se progressivamente em um gás de nêutrons. Esses nêutrons, por sua vez, comprimem-se entre si até atingirem a degenerescência de nêutrons, processo análogo ao que ocorre com os elétrons na anã branca. A pressão gerada pelos nêutrons, é capaz de reduzir o colapso gravitacional. No entanto, a densidade atinge níveis tão extremos que o equilíbrio não é alcançado (Gregorio-Hetem; Jatenco-Pereira, 2010; Horvath, 2022).

Em seguida, o núcleo estelar, agora composto de nêutrons, resiste à compressão e interrompe o colapso. As camadas externas que ainda despencavam se chocam contra esse núcleo rígido e são arremessadas de volta por uma enorme onda de choque, sendo ejetadas explosivamente para o espaço — levando consigo até mesmo o ferro do núcleo interno. Esse evento, altamente energético, é conhecido

como explosão de supernova. Existem dois tipos principais: o tipo II, descrito acima, resulta do colapso do núcleo de uma estrela massiva, restando dele um núcleo de nêutrons; já o tipo I decorre de uma anã branca. Como visto anteriormente, uma anã branca é normalmente sustentada pela pressão de degenerescência dos elétrons. Porém, quando ela faz parte de um sistema binário, pode receber matéria de sua estrela companheira; se sua massa ultrapassar 1,4 massas solares, a pressão de degenerescência deixa de ser suficiente, a fusão do carbono se inicia de forma descontrolada e a estrela explode por inteiro — um evento semelhante ao das estrelas massivas, mas por um motivo diferente (Gregorio-Hetem; Jatenco-Pereira, 2010; Bandecchi; Horvath; Bretones, 2019; Thorne, 1994).

4.4 Estrelas de Nêutrons

Na supernova do tipo I, não sobra nada da estrela original depois da explosão. Porém, nas de tipo II, resta um pequeno “caroço” muito denso, proveniente da estrela original. Como já visto anteriormente, antes da explosão de supernova acontecer, elétrons e prótons se fundem de forma a produzir nêutrons e neutrinos. Os neutrinos, por sua vez, conseguem escapar e aceleram a propagação da onda de choque, que detonou o processo explosivo. Essa onda não se inicia exatamente no centro da estrela, deixando a parte mais interna do núcleo estelar intacta. O núcleo é formado basicamente de nêutrons, e, portanto, esse remanescente é chamado de **Estrela de Nêutrons**. Seu tamanho é muito pequeno, cerca de 10 a 20 km de raio, e sua densidade é extrema - da ordem de $10^{17} \text{ kg.m}^{-3}$ - bilhões de vezes mais denso que uma anã branca. Uma característica marcante das estrelas de nêutrons é sua velocidade de rotação extrema, com períodos medidos em frações de segundos - essa velocidade é resultante da conservação de momento angular. Outra característica importante é o forte campo magnético, criado pela compressão das linhas de campo, durante o processo de contração. É por meio dessas duas propriedades que a detecção e o estudo desses objetos são possíveis (Gregorio-Hetem; Jatenco-Pereira, 2010; Oliveira Filho; Saraiva, [s.d.]).

A primeira detecção de uma estrela de nêutrons ocorreu em 1967, embora sua existência já tivesse sido prevista teoricamente na década de 1930, muito antes da confirmação observacional (Thorne, 1994). Esse objeto foi identificado por meio de emissões de rádio que chegavam em pulsos de frequência regular e invariável, o que

lhe rendeu o nome de pulsar. Trata-se de uma estrela de nêutrons cujo eixo magnético não coincide com o eixo de rotação: enquanto ela gira, os feixes de radiação emitidos por seus polos magnéticos varrem o espaço como o fecho de um farol. Cada vez que um desses feixes aponta em direção à Terra, registramos um pulso - daí a emissão periódica que caracteriza esses objetos (Gregorio-Hetem; Jatenco-Pereira, 2010; Oliveira Filho; Saraiva, [s.d.]).

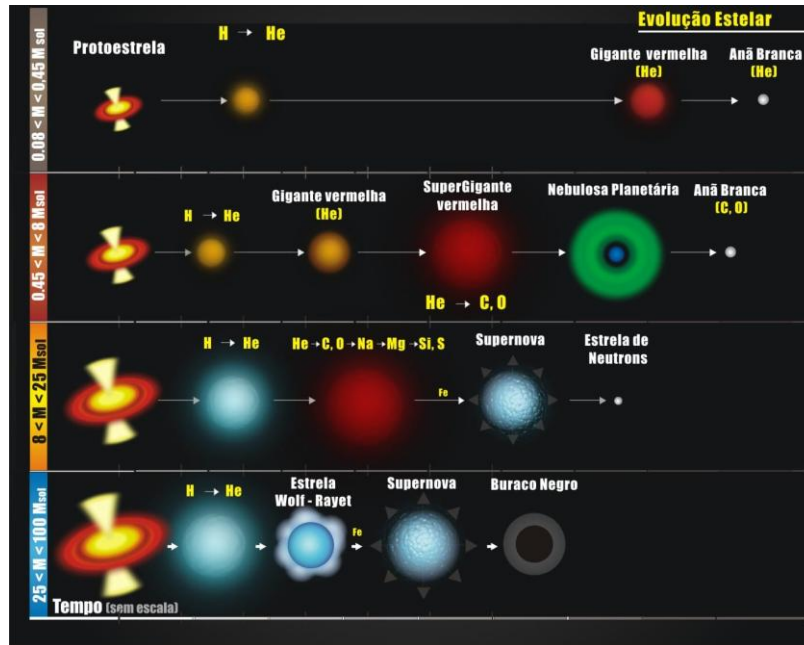
Figura 6 – A Nebulosa do Caranguejo (M1), remanescente da supernova observada no ano de 1054; o ponto brilhante em seu centro é um pulsar, a estrela de nêutrons que restou da explosão. Imagem do Telescópio Espacial James Webb.



Fonte: NASA, ESA, CSA e STScI (2023).

Assim como as anãs brancas têm um limite de 1,4 massas solares para não colapsar, estrelas de nêutrons também possuem um limite até que a pressão proveniente da degenerescência de nêutrons possa sustentá-la. Quando as estrelas de nêutrons têm massa acima de três massas solares, a pressão da degenerescência de nêutrons não é suficiente para contrabalancear o colapso. Com o colapso ocorrendo de forma contínua, surge o objeto mais extremo da física estelar: o **buraco negro**; sua gravidade é tão intensa que nem a luz consegue escapar (Gregorio-Hetem; Jatenco-Pereira, 2010; Bandecchi; Horvath; Bretones, 2019; Thorne, 1994).

Figura 7 – Esquema da evolução estelar, sem escala, para diferentes faixas de massa: da protoestrela aos destinos finais (anã branca, estrela de nêutrons e buraco negro).



Fonte: Oliveira Filho e Saraiva ([s.d.]).

5 Buracos Negros

5.1 Formação de Buracos Negros

Como vimos anteriormente, após a explosão de supernova do tipo II sobra um pequeno corpo remanescente do núcleo da estrela. Se esse “caroço” restante tiver uma massa acima de três massas solares, nem a degenerescência de nêutrons segura o colapso gravitacional e ele ocorre de forma contínua e inevitável, nada o detém. A gravidade nesse momento é tão intensa, que a velocidade de escape necessária supera a da luz. Como nada viaja mais rápido que a luz, nem ela consegue escapar dessa região - e é isso que caracteriza um buraco negro (Gregorio-Hetem; Jatenco-Pereira, 2010; Thorne, 1994).

5.2 Horizonte de Eventos

A região da qual nem a luz escapa tem um limite bem definido, e é chamado de horizonte de eventos. Não se trata de uma superfície física, mas um limite invisível no espaço. Até cruzar esse limite ainda é possível escapar do campo gravitacional do buraco negro, mas ao cruzá-lo não mais. O nome vem justamente daí: nenhum evento que aconteça além dessa fronteira pode ser visto ou comunicado ao resto do universo.

A distância entre o centro o buraco negro e o horizonte de eventos é chamado de raio de Schwarzschild, e está relacionado apenas a massa do objeto - quanto maior a massa, maior o horizonte. Um buraco negro com a massa do Sol, teria apenas 3km; um de três massas solares, aproximadamente 9km (Gregorio-Hetem; Jatenco-Pereira, 2010; Thorne, 1994).

5.3 A Radiação Hawking

Até aqui, vimos que nada é capaz de escapar de um buraco negro. Porém, isso só é verdade quando os efeitos da mecânica quântica são desconsiderados. Na década 1970, Stephen Hawking mostrou que ao considerar esses efeitos, os buracos negros passam a emitir partículas - uma emissão que ficou conhecida como radiação Hawking. Para compreender isso, é necessário saber que o vácuo, na física quântica, não é realmente vazio: nele surgem constantemente pares de partícula e antipartícula, que aparecem e se aniquilam em um intervalo de tempo extremamente curto.

O fenômeno ocorre quando um desses pares surge exatamente na borda do horizonte de eventos. Nesse caso, pode acontecer de uma das partículas cair para dentro do buraco negro enquanto a outra permanece do lado de fora. A partícula que escapou perde o seu par, e não é mais aniquilada, tornando-se uma partícula real e se propagando para longe. Para um observador externo, é como se o buraco negro estivesse emitindo partículas. Essa energia emitida, tem um custo: ela é retirada do próprio buraco negro, que perde massa lentamente. Ao longo de períodos extremamente longos, ele encolhe cada vez mais e pode, eventualmente, evaporar por completo (Santi; Santarelli, 2019; Neves, 2020).

6 Relatividade Especial e seus Fundamentos

A teoria da relatividade surge como uma formulação capaz de descrever fenômenos físicos não apenas em regimes de baixas velocidades, nos quais a mecânica clássica apresenta grande sucesso, mas também em situações envolvendo velocidades próximas à velocidade da luz. A partir dessa nova interpretação, grandezas anteriormente consideradas absolutas, como espaço e tempo, passam a depender do estado de movimento do observador. Entretanto, essa relatividade não ocorre de maneira arbitrária, uma vez que certas quantidades permanecem invariantes entre referenciais, destacando-se a velocidade da luz no vácuo, cuja constância foi motivada por resultados experimentais como os obtidos no experimento de Michelson–Morley.

6.1 Limitações da Mecânica Clássica

No estudo da mecânica newtoniana, o tempo é tratado como uma grandeza absoluta - descrição a qual assume que diferentes observadores inerciais compartilham uma mesma descrição temporal para eventos físicos. Nesse sentido, medidas de tempo independem do estado de movimento relativo entre observadores, permitindo a formulação das transformações galileanas clássicas de coordenada. Tal formalismo apresenta elevada precisão na descrição de fenômenos envolvendo velocidades pequenas em comparação à velocidade da luz.

Considere dois observadores inerciais, A e B, associados a referenciais distintos. O observador A descreve os eventos por meio das coordenadas (x, t) , enquanto o observador B, que se move com velocidade relativa constante v em relação a A, utiliza as coordenadas (x', t') . Na mecânica clássica, a mudança entre esses referenciais é realizada pelas transformações de Galileu, expressas por:

$$x' = x - vt \quad (1)$$

$$t' = t \quad (2)$$

em que v representa a velocidade relativa entre observadores. De maneira análoga, a composição clássica de velocidades derivada de (1) e (2) pode ser expressa por:

$$V_{Res} = V_{Rel} + V_1 \quad (3)$$

Em que V_{Rel} representa a velocidade de uma partícula “móvel” em relação ao referencial em movimento, V_1 corresponde a velocidade do referencial móvel em relação a um observador “fixo” e V_{Res} é a velocidade da partícula com relação a um referencial “fixo”.

Entretanto, embora esse modelo apresente resultados satisfatórios em diversas aplicações físicas, sua validade torna-se limitada ao considerar sistemas envolvendo velocidades próximas à velocidade da luz, situação na qual diversas previsões experimentais tornam-se incompatíveis com a formulação clássica. Tal incompatibilidade motivou o desenvolvimento da teoria da relatividade especial formulada por Albert Einstein em 1905, introduzindo uma nova interpretação para os conceitos de espaço e tempo.

6.2 Postulados da Relatividade Especial

- 1 - Princípio da Relatividade -

As leis físicas são as mesmas em todos os referenciais inerciais. Não há observador privilegiado, ou absoluto nas descrições de eventos no espaço-tempo

- 2 - Princípio da constância da Velocidade da Luz C

A Luz possui uma velocidade constante no vácuo que independe do movimento do observador ou da fonte emissora.

6.3 Dilatação Temporal, Contração Espacial e o Fator de Lorentz

No âmbito dos postulados da relatividade especial, a interpretação newtoniana de espaço e tempo absolutos mostra-se insustentável. A ausência de referenciais privilegiados, combinada à invariância da velocidade da luz no vácuo para qualquer observador inercial, impõe que medidas de intervalos espaciais e temporais associadas a um mesmo evento físico sejam, em geral, distintas entre referenciais em

movimento relativo. Para que a constância de 3×10^8 m/s seja mantida de forma consistente, as transformações entre referenciais devem necessariamente acoplar as coordenadas espaciais e temporais.

Desse acoplamento emerge o fator de Lorentz, grandeza adimensional que quantifica a magnitude dos efeitos relativísticos sobre as descrições espaço-temporais em função da velocidade relativa entre os referenciais inerciais.

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (4)$$

onde v denota a velocidade relativa entre os referenciais, c a velocidade da luz no vácuo e γ o fator de Lorentz. Essa formulação permite inferir dois fenômenos diretamente verificáveis: a contração do espaço e a dilatação do tempo expressas, respectivamente, por:

$$L = L_0 / \gamma \quad (5)$$

$$t = \gamma t_0 \quad (6)$$

6.4 Transformações de Lorentz

Diante da dependência entre as coordenadas espaciais e temporais introduzida pela relatividade especial, torna-se necessário reformular a maneira pela qual medidas realizadas em diferentes referenciais são relacionadas. Uma vez que observadores em movimento relativo atribuem valores distintos a intervalos espaciais e temporais para um mesmo fenômeno físico, as transformações clássicas deixam de fornecer descrições compatíveis com os postulados relativísticos.

Nesse contexto, introduzem-se as transformações de Lorentz, responsáveis por relacionar as coordenadas espaço-temporais entre referenciais inerciais distintos, preservando a forma das leis físicas e garantindo a constância da velocidade da luz no vácuo.

$$x' = \gamma(x - vt) \tag{7}$$

$$t' = \gamma(t - \frac{vx}{c^2}) \tag{8}$$

7 Espaço-Tempo de Minkowski

O espaço-tempo de Minkowski introduz-se com o intuito de fornecer uma formulação geométrica compatível com os resultados da relatividade especial. Nessa descrição, espaço e tempo deixam de ser tratados como grandezas independentes e passam a compor uma única estrutura quadridimensional, na qual os eventos físicos são representados por três coordenadas espaciais e uma coordenada temporal, que se combinam para preservar a estrutura geométrica do espaço-tempo e a forma das leis físicas em diferentes referenciais inerciais.

Uma vez que medidas de comprimento e intervalo temporal próprios dependem do estado de movimento relativo entre observadores, define-se uma grandeza invariante denominado intervalo espaço-temporal, preservada entre referenciais inerciais e utilizada como elemento geométrico fundamental na descrição relativística.

7.1 Eventos e Representação Espaço-Temporal

No contexto do espaço-tempo de Minkowski, um evento corresponde a uma ocorrência física associada a uma posição e um instante específicos, sendo representado por um conjunto de coordenadas da forma (t, x, y, z) . Tal representação permite descrever fenômenos físicos em uma estrutura quadridimensional unificada, na qual espaço e tempo passam a constituir componentes de uma mesma entidade geométrica.

A evolução temporal de um observador ou sistema físico nessa estrutura é representada por uma trajetória denominada linha de mundo, cuja forma depende do estado de movimento considerado. Dessa maneira, diagramas espaço-temporais constituem uma ferramenta geométrica para a análise das relações entre eventos observados em diferentes referenciais.

7.2 Diagramas de Espaço-Tempo

Diagramas espaço-temporais constituem representações gráficas utilizadas para descrever a posição e a evolução temporal de eventos em uma mesma estrutura geométrica. Nessa representação, convencionou-se dispor a coordenada temporal ao longo do eixo vertical e as coordenadas espaciais ao longo dos eixos horizontais,

permitindo a visualização simultânea das relações espaciais e temporais associadas a um evento.

7.3 O Intervalo Invariante Espaço-Temporal e a Métrica

O intervalo espaço-temporal entre dois eventos é definido por

$$ds^2 = -c^2 dt^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2 \quad (9)$$

sendo ds^2 uma quantidade invariante sob transformações de Lorentz. Dessa forma, embora diferentes observadores possam medir valores distintos para intervalos espaciais e temporais, todos concordam quanto ao valor do intervalo associado a um mesmo par de eventos.

Tal propriedade está diretamente relacionada à invariância da velocidade da luz e constitui o elemento geométrico fundamental do espaço-tempo de Minkowski.

De forma equivalente, o intervalo pode ser representado por meio da métrica $g_{\mu\nu}$, definida pela matriz

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

permitindo escrever o intervalo na forma compacta

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu \quad (10)$$

onde dx^μ e dx^ν representam as componentes do deslocamento infinitesimal entre dois eventos no espaço-tempo. Nessa formulação, a métrica atua como o objeto matemático responsável por definir a medida geométrica entre eventos e recuperar o intervalo espaço-temporal anteriormente definido.

Utiliza-se ainda a convenção de soma de Einstein, segundo a qual índices repetidos indicam somatório automático sobre as componentes espaço-temporais, fornecendo uma representação compacta para operações geométricas no espaço-tempo.

7.4 Cones de Luz e Causalidade

A partir da definição do intervalo espaço-temporal, observa-se que quando

$$ds^2 = 0$$

A separação entre dois eventos é dita do tipo luz. Nesse caso, considerando uma dimensão espacial bidimensional, obtém-se

$$dx = cdt$$

indicando que a separação entre os eventos corresponde exatamente à trajetória que seria percorrida por um sinal luminoso.

Em diagramas espaço-temporais, com ct no eixo vertical e x no eixo horizontal, trajetórias são representadas por retas inclinadas a 45 graus, que delimitam uma região denominada cone de luz. Essa estrutura estabelece as relações de causalidade no espaço-tempo, separando eventos que podem ser fisicamente conectados, aqueles em que $ds^2 < 0$ - tipo Tempo - casualmente conectáveis, daqueles que exigiram velocidades superiores à da luz em que $ds^2 > 0$ - tipo Espaço - casualmente incontactáveis.

8 Espaço-Tempo de Rindler e Princípio de Equivalência

8.1 Espaço-Tempo de Rindler

Para a descrição de observadores com aceleração própria constante, no entanto, é necessária uma parametrização nova, já que, em Minkowski, as coordenadas estavam associadas a observadores inerciais, sem a presença de matéria- isto é, o espaço tempo era plano. Dessa maneira, surge a descrição espaço-temporal de Rindler. Nela, os referenciais possuem aceleração própria constante, e são, no diagrama, representados por hipérboles assintóticas aos cones de luz, dado que sua velocidade nunca pode ultrapassar a velocidade da luz.

Ao impor a aceleração como constante, obtém-se, a partir do elemento de linha a seguinte expressão para a hipérbole:

$$x^2 - c^2 t^2 = \frac{c^4}{a^2}$$

Define-se então, para simplificação das descrições, um parâmetro ξ o qual identifica cada uma das hipérboles tal que

$$\xi = \sqrt{x^2 - c^2 t^2}$$

Graficamente, esse parâmetro pode ser visualizado como a distância do vértice de cada uma das hipérboles até o centro de coordenadas, ao longo do eixo x.

Além disso, observa-se que $\xi = \frac{c^2}{a}$ logo, à medida que ξ aumenta, a aceleração diminui, representado uma hipérbole de curva menos acentuada, e aceleração menos intensa.

8.2 Princípio da Equivalência

A descrição de Rindler evidencia que observadores acelerados percebem o espaço tempo de maneira distinta daquela observada em referenciais inerciais. Em particular, observadores localizados em hipérboles diferentes, por possuírem acelerações próprias distintas, medem intervalos temporais diferentes, de modo que

relógios situados em posições distintas do referencial acelerado não permanecem sincronizados.

O comportamento dos corpos em queda e as diferenças no fluxo temporal observadas nesse contexto são análogos aos fenômenos verificados em campos gravitacionais. A partir dessa equivalência, Einstein postulou que era impossível distinguir os efeitos produzidos por um campo gravitacional daqueles promovidos pela aceleração própria. Tal postulado ficou conhecido como princípio da equivalência, e permite interpretar a gravidade não como uma força no sentido clássico, mas como uma geometria espaço-temporal.

8.3 As Equações de Einstein

Tal princípio conduz a uma reformulação da gravidade como uma manifestação da geometria espaço-temporal, estrutura curvada pela presença de energia. Nesse contexto, Einstein formulou as equações de campo da relatividade geral expressas por:

$$G_{\mu\nu} = \frac{8\pi G}{c^4} T_{\mu\nu} \quad (11)$$

Em que $G_{\mu\nu}$ representa a geometria e a curvatura do espaço tempo, e $T_{\mu\nu}$ corresponde ao tensor energia momento, que descreve a distribuição de matéria e energia. Dessa forma, a dinâmica gravitacional passa a ser entendida como uma relação entre geometria e conteúdo material, na qual a presença de massa e energia determina a estrutura métrica do espaço-tempo e, conseqüentemente, o movimento das partículas livres e da radiação.

9 A Energia, a Quadrivelocidade e o Quadrimomento de uma Partícula

Conceitos físicos como velocidade e momento, a partir da análise relativística de manutenção do invariante espaço-temporal, assumem formas mais gerais, associadas à métrica. A quadrivelocidade representa a derivada com relação ao tempo próprio - isto é, o tempo medido no referencial da própria partícula - do quadrivetor X^μ (ct, x, y, z) de modo que $U^\mu = \frac{dX^\mu}{d\tau}$, em que τ é o tempo próprio, cujas componentes descrevem a evolução temporal e espacial da partícula no espaço-tempo. Multiplicando-se a quadrivelocidade pela massa invariante do corpo, obtém-se o quadrimomento,

$$P^\mu = U^\mu \cdot m = (\gamma mc, \gamma mv)$$

sendo U^μ o quadrivetor velocidade, tal que $U^\mu = \gamma(c, v)$ e P^μ o quadrimomento da partícula, tal que $P^\mu = \gamma m(c, v_x, v_y, v_z)$

Daí, deriva-se o fato de que, como $E = \gamma mc^2$, conclui-se que a componente temporal do quadrimomento corresponde à energia relativística da partícula dividida pela velocidade da luz, isto é

$$P^0 = \frac{E}{c}$$

9.1 A Solução de Schwarzschild

A obtenção de soluções particulares das equações de campo permite descrever diferentes configurações gravitacionais de interesse físico. Dentre elas, destaca-se a solução de Schwarzschild, correspondente ao caso de uma distribuição de massa esfericamente simétrica, estacionária e desprovida de rotação.

Essa solução fornece a descrição mais simples de um campo gravitacional relativístico e possibilita a análise de fenômenos como a dilatação temporal gravitacional, a curvatura das trajetórias geodésicas e a existência de horizontes de eventos, constituindo a base para o estudo dos buracos negros não rotacionais.

A geometria espaço temporal associada a essa formulação pode ser expressa matematicamente por:

$$ds^2 = -\left(1 - \frac{2GM}{rc^2}\right) c^2 dt^2 + \left(1 - \frac{2GM}{rc^2}\right)^{-1} dr^2 + r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta d\phi^2 \quad (12)$$

Em que representa a coordenada radial (ou raio areal), definida de modo que superfícies esféricas centradas na massa possuam área $4\pi r^2$, G a constante gravitacional e M o valor da massa.

À luz dessa formulação, e tomando o buraco negro como não racional, são observáveis a dilatação temporal e a contração espaço-temporal, haja vista que o intervalo invariante que descreve o raio real da estrela representado por

$$\int_{r_0}^{r_1} ds = \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{\left(1 - \frac{2GM}{rc^2}\right)^{-1}} dr > r_1 - r_0$$

tomando $dt^2 = 0$ e $+r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta d\phi^2 = 0$. Dessa maneira é nítido que a distância radial própria é superior à diferença entre as coordenadas radiais, evidenciando a curvatura do espaço nas proximidades da massa. Já para a dilatação temporal:

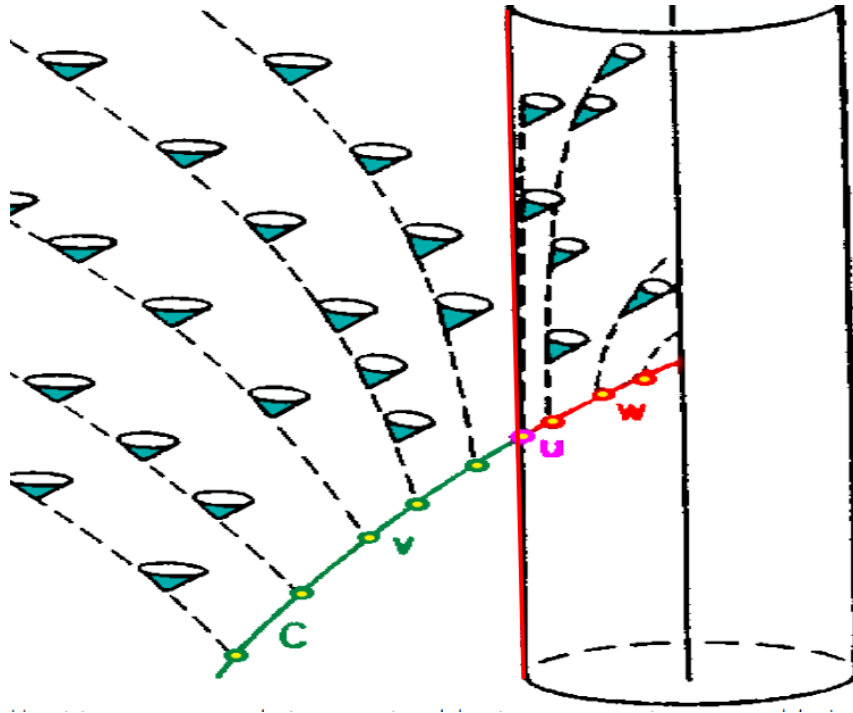
$$\int_{t_0}^{t_1} ds = \int_{t_0}^{t_1} \sqrt{\left(1 - \frac{2GM}{rc^2}\right)} c^2 dt^2 < t_1 - t_0$$

Tomando um observador estacionário. Isso evidencia que o fluxo temporal transcorre de maneira mais devagar nas proximidades do corpo.

Também é notório o raio limite $r_s = \frac{2GM}{c^2}$, em que a métrica apresenta singularidade aparente de coordenadas, valor denominado raio de Schwarzschild. Essa medida representa o valor crítico da coordenada radial que delimita o horizonte de eventos de um buraco negro não rotacional.

9.2 Diagrama de Espaço-Tempo de Schwarzschild e os Cones de Luz

Figura 8 – Nesse diagrama, a região delimitada pelo cilindro representa o interior do horizonte de eventos, cuja fronteira é indicada pela linha vermelha que passa pelo ponto U. Em regiões suficientemente distantes da massa, os cones de luz apresentam-se aproximadamente simétricos, refletindo a estrutura causal do espaço-tempo plano discutida anteriormente no contexto de Minkowski. À medida que se aproximam do objeto gravitacional, os cones inclinam-se progressivamente em direção à massa.



Fonte: adaptado de Orsi ([s.d.], p. 93).

No limite do raio de Schwarzschild, uma das geratrizes do cone de luz coincide com o horizonte de eventos. No interior dessa região, todas as trajetórias causais futuras apontam para a singularidade, que passa a constituir o destino causal inevitável de toda partícula ou radiação que ultrapasse o horizonte.

Considerando trajetórias luminosas radiais, tal comportamento pode ser obtido diretamente a partir da métrica de Schwarzschild. Impondo $ds^2 = d\theta = d\phi = 0$ obtém-se

$$\frac{dr}{dt} = \pm c \left(1 - \frac{2GM}{rc^2}\right)$$

logo, caso $r \gg r_s = \frac{2GM}{c^2}$ tem-se que

$$\frac{dr}{dt} \rightarrow \pm c$$

recuperando a trajetória de um raio no espaço tempo plano. No entanto, no limite $r \rightarrow r_s$ observa-se que

$$\frac{dr}{dt} \rightarrow 0$$

ou seja, nas coordenadas de Schwarzschild a velocidade radial da luz tende a 0, fato que pode ser observado geometricamente pela inclinação progressiva dos cones de luz em direção ao interior do buraco negro.

No interior do horizonte, $r < r_s$, o termométrico $\left(1 - \frac{2GM}{rc^2}\right)$ torna-se negativo, matematicamente, isso indica que a coordenada radial passa a desempenhar o papel de uma coordenada temporal, enquanto t torna-se espacial.

Embora a solução de Schwarzschild descreva adequadamente o campo gravitacional externo de corpos esféricos simétricos e não rotacionais, a maior parte dos objetos astrofísicos reais possui momento angular diferente de zero. Nessas condições, a rotação da massa modifica a estrutura do espaço-tempo circundante, tornando necessária uma solução mais geral das equações de Einstein.

10 Métrica de Kerr

Embora a solução de Schwarzschild constitua a descrição relativística mais simples de um campo gravitacional, ela apresenta limitações na representação de objetos astrofísicos reais, uma vez que se espera que buracos negros formados por processos naturais possuam momento angular diferente de zero em virtude da conservação do momento angular decorrente de sua formação.

Nesse contexto, a solução de Kerr surge como uma generalização da métrica de Schwarzschild para corpos em rotação, incorporando os efeitos do momento angular sobre a geometria espaço-temporal. Sua forma matemática pode ser expressa por:

$$ds^2 = -(\Delta/\rho^2)[dt - a \sin^2 \theta d\phi]^2 + (\sin^2 \theta/\rho^2)[(r^2 + a^2) d\phi - a dt]^2 + (\rho^2/\Delta) dr^2 + \rho^2 d\theta^2$$

Em que $d\phi$ representa a rotação, e a é o parâmetro de rotação $\frac{J}{Mc}$ sendo J seu momento angular e M sua massa. Nesse cenário, surge um outro valor, para além do raio de schwarzschild, de grande relevância, ele é dado por:

$$r = r_0(\theta) \equiv m + (m^2 - q^2 - a^2 \cos^2 \theta)^{\frac{1}{2}}$$

Ele representa o chamado limite estático, e corresponde à superfície além da qual não há trajetórias fisicamente possíveis com $d\phi = 0$. A região determinada entre esse limite e o horizonte de eventos da massa é denominada ergosfera e compreende uma área em que, para partículas cujas trajetórias satisfaçam $ds^2 \leq 0$, $d\phi$ é necessariamente diferente de 0.

Tal fato ocorre pois o termo métrico torna-se negativo, ou seja $g_{tt} > 0$, implicando que mesmo para observadores com $dr = d\theta = d\phi = 0$, obtém-se $ds^2 > 0$, indicando que não existem trajetórias temporais correspondentes a partículas em repouso em relação a observadores localizados no infinito.

Desse modo, uma partícula nessa região é forçada a adquirir velocidade angular no mesmo sentido da rotação do buraco negro efeito conhecido como Frame dragging.

No entanto, como discutido anteriormente, a energia medida por um observador localizado no infinito pode ser associada à componente temporal do quadrimomento da partícula. Nesse contexto, a presença do termo misto $d\phi dt$, responsável pelo arrastamento de referenciais, permite que, no interior da ergosfera, existam trajetórias para as quais essa energia assuma valores negativos.

Tal propriedade constitui o fundamento físico do processo de Penrose e dos mecanismos de extração de energia de buracos negros rotacionais.

11 Propriedades Gerais dos Buracos Negros

11.1 Horizonte de Eventos

O horizonte de eventos representa o limite em que os cones de luz possuem uma de suas geratrizes coincidentes com as fronteiras delimitadas pelo buraco negro, ele define a região causalmente desconectada do infinito. Após sua travessia, toda e qualquer trajetória temporal futura conduzirá à singularidade, que se torna o destino causal de qualquer partícula ou radiação que se encontre no interior dessa região. Sua distância corresponde, matematicamente, para um buraco negro de Schwarzschild, a:

$$r = r_s = \frac{2GM}{c^2}$$

11.2 Singularidade Gravitacional Real

Ela corresponde à região em que as quantidades geométricas associadas à curvatura espaço temporal divergem, isto é, na descrição de Schwarzschild, o ponto em que $r = 0$.

11.3 Buracos Negros “Não Possuem Cabelo”

Tal propriedade diz respeito à plena capacidade de descrição de um buraco negro por meio de apenas 3 grandezas macroscópicas: sua carga elétrica, massa e seu momento angular. Dessa maneira, propriedades mais específicas relacionadas à matéria que deu origem ao colapso gravitacional é inacessível a observadores externos.

11.4 Frame Dragging

Em buracos negros rotacionais, o momento angular da massa central induz uma conformação geométrica em que todo e qualquer observador próximo ao objeto passará a ser arrastado em seu sentido de rotação. Tal efeito denominado arrastamento de referenciais, ocorre na região delimitada entre o limite estático e o horizonte de eventos, conhecida pelo nome de ergosfera.

11.5 Lei das Áreas

Segundo o teorema das áreas proposto por Stephen Hawking, a área de um buraco negro nunca diminui em processos físicos clássicos tais como a absorção de matéria ou a fusão entre dois buracos negros. Dessa forma, tais processos sempre resultam em uma área final igual ou superior à área inicial.

12 Conclusão

Este trabalho teve como objetivo apresentar o ciclo de vida das estrelas e os fundamentos físicos e matemáticos necessários para compreender a formação e as propriedades dos buracos negros, articulando a descrição astrofísica da evolução estelar com o tratamento relativístico do espaço-tempo. O percurso partiu da formação das estrelas em nuvens moleculares e chegou às soluções de Schwarzschild e de Kerr para a descrição desses objetos.

Pela via astrofísica, ficou claro que as estrelas nascem do colapso gravitacional de regiões densas dentro de nuvens moleculares. Nesse processo surgem as protoestrelas, que se contraem e esquentam até reunir as condições para iniciar a fusão nuclear; a partir daí a estrela entra na sequência principal, fase em que a contração gravitacional e a pressão gerada pelas reações termonucleares se equilibram.

A massa é o que decide o destino de cada estrela. As de menor massa costumam terminar como anãs brancas, depois de expelir as camadas externas e formar uma nebulosa planetária. Já as mais massivas fundem elementos cada vez mais pesados até formar um núcleo de ferro; como essa fusão não gera energia suficiente para sustentar a estrela, o núcleo colapsa e ocorre a explosão de supernova, que pode gerar uma estrela de nêutrons ou, quando a massa remanescente é grande o bastante, um buraco negro.

Descrever esses objetos exige ir além da mecânica clássica. A relatividade especial mostrou que medidas de espaço e tempo dependem do movimento do observador, ainda que certas grandezas, como o intervalo espaço-temporal e a velocidade da luz no vácuo, permaneçam invariantes. As transformações de Lorentz, o fator de Lorentz, a dilatação temporal e a contração espacial explicam como espaço e tempo passam a se relacionar quando as velocidades se aproximam da velocidade da luz.

O espaço-tempo de Minkowski deu a esses eventos uma estrutura geométrica quadridimensional e permitiu entender a causalidade através dos cones de luz. Já a análise do espaço-tempo de Rindler, com seus referenciais acelerados, levou ao entendimento do princípio da equivalência: os efeitos de uma aceleração podem,

localmente, ser indistinguíveis dos efeitos de um campo gravitacional. Esse princípio é a base da relatividade geral, em que a gravidade passa a ser entendida como curvatura do espaço-tempo causada pela presença de matéria e energia.

A solução de Schwarzschild descreve o campo gravitacional externo de um corpo esférico sem rotação, e foi a partir dela que se analisaram o raio de Schwarzschild, o horizonte de eventos, a dilatação temporal gravitacional e o comportamento dos cones de luz perto de um buraco negro. O horizonte de eventos é uma fronteira causal invisível, sem existência física própria: ultrapassá-lo significa que toda trajetória futura possível passa a levar ao interior do buraco negro, sem volta.

Essa solução, porém, não leva em consideração nem o momento angular nem a carga e, por isso, não é capaz de descrever a grande maioria dos buracos negros reais, dotados de tais propriedades. Daí a importância da solução de Kerr, que descreve buracos negros em rotação. Nela aparece a ergosfera, região em que o arrastamento de referenciais impede que uma partícula fique parada em relação a um observador distante; é essa possibilidade de trajetórias com energia negativa que sustenta o processo de Penrose, capaz de extrair energia de rotação do buraco negro.

Do ponto de vista das propriedades gerais, um buraco negro pode ser descrito apenas por três grandezas: massa, carga elétrica e momento angular. E, em processos físicos clássicos, a área do seu horizonte de eventos nunca diminui, como estabelece o teorema das áreas. Isso mostra que, apesar das condições extremas, os buracos negros têm uma estrutura física e geométrica bem definida.

A radiação Hawking, no entanto, revela que essa descrição clássica não é suficiente: ao considerar a mecânica quântica, os buracos negros passam a emitir partículas perto do horizonte de eventos, perdendo massa e energia aos poucos. Em prazos extremamente longos, esse processo pode reduzir e até evaporar completamente um buraco negro. Isso conecta a relatividade geral, a mecânica quântica e a termodinâmica: o estudo dos buracos negros toca em algumas das principais teorias da física moderna.

Compreender os buracos negros, portanto, passa tanto pelos processos astrofísicos que levam à sua formação quanto pela descrição relativística do espaço-tempo. A evolução estelar explica como esses objetos surgem do colapso de estrelas

massivas; as soluções de Schwarzschild e Kerr explicam suas propriedades e sua estrutura causal. Juntas, essas duas frentes mostram os buracos negros como um resultado possível da vida das estrelas e, ao mesmo tempo, como um dos objetos mais úteis para testar os limites da física atual.

REFERÊNCIAS

- ANTUNES ROSA, C. et al. Miller e Urey no Universo: detecção de moléculas prebióticas em regiões de formação estelar. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 47, e20250125, 2025. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/1806-9126-RBEF-2025-0125>. Acesso em: 11 jul. 2026.
- BANDECCHI, M.; BRETONES, P. S.; HORVATH, J. E. O equilíbrio e a estrutura estelar em uma abordagem simples: a Seqüência Principal. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 41, n. 4, e20190031, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/1806-9126-RBEF-2019-0031>. Acesso em: 11 jul. 2026.
- FELIPE, B. S.; OLIVEIRA, J. Introdução aos buracos negros e sua termodinâmica. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 46, e20240010, 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/1806-9126-RBEF-2024-0010>. Acesso em: 11 jul. 2026.
- GREGORIO-HETEM, J.; JATENCO-PEREIRA, V. **Observatórios Virtuais — Fundamentos de Astronomia**. São Paulo: IAG/USP, 2010. Disponível em: <http://www.astro.iag.usp.br/~jane/aga215/apostila/>. Acesso em: 11 jul. 2026.
- GREGORIO-HETEM, J.; LEPINE, J. R. D.; QUAST, G. R.; TORRES, C. A. O.; DE LA REZA, R. A search for T Tauri stars based on the IRAS point source catalog. I. **The Astronomical Journal**, v. 103, n. 2, p. 549-563, 1992. Disponível em: <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1992AJ....103..549G/abstract>. Acesso em: 11 jul. 2026.
- HORVATH, J. E. A degenerescência do gás de elétrons e sua importância em Astrofísica. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 44, e20220002, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/1806-9126-RBEF-2022-0002>. Acesso em: 11 jul. 2026.
- MAIA GIL, S.; SILVA PINHO, J.; FERNANDES DE FERNANDES, I. Nascimento e morte de uma estrela em uma abordagem simples para o ensino médio: a evolução estelar. **Caderno de Física da UEFS**, v. 21, n. 1, p. 1401.1-18, 2023. Disponível em: <https://periodicos.uefs.br/index.php/cadfis/article/view/10410>. Acesso em: 11 jul. 2026.
- NASA. **Stars**. Science.nasa.gov, [s.d.]. Disponível em: <https://science.nasa.gov/universe/stars/>. Acesso em: 11 jul. 2026.
- NEVES, J. C. S. O buraco negro e sua sombra. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 42, e20200216, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/1806-9126-rbef-2020-0216>. Acesso em: 11 jul. 2026.
- OLIVEIRA FILHO, K. S.; SARAIVA, M. F. O. **Star Formation**. Departamento de Astronomia, Instituto de Física, UFRGS. Porto Alegre, [s.d.]. Disponível em: https://www.if.ufrgs.br/oei/stars/formation/form_st.htm. Acesso em: 11 jul. 2026.
- ORSI, Jorge A. R. **Teoria da Formação de Galáxias**. Rio de Janeiro: Universidade Federal do Rio de Janeiro, [s.d.]. Disponível em:

https://www.if.ufrj.br/~joras/disciplinas/16.1/tfg1/joras_tfg1.pdf. Acesso em: 11 jul. 2026.

REBOLO, R.; ZAPATERO OSORIO, M. R.; MARTÍN, E. L. Discovery of a brown dwarf in the Pleiades star cluster. **Nature**, v. 377, p. 129-131, 1995. Disponível em: <https://www.nature.com/articles/377129a0>. Acesso em: 11 jul. 2026.

SARAIVA, M. F. O. **Etapas evolutivas das estrelas**. Departamento de Astronomia, Instituto de Física, UFRGS. Porto Alegre, [s.d.]. Disponível em: <https://www.if.ufrgs.br/~fatima/ead/estrelas.htm>. Acesso em: 11 jul. 2026.



GATOS INSTÁVEIS

Novas fronteiras da radioterapia: FLASH-RT e análise de resultados em simulação Monte Carlo

Filipe Campos Ribeiro

Orientadora: Profa. Dra. Juliana Fernandes Pavoni
Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da
Universidade de São Paulo

2026



ESCOLA DE TALENTOS DO INSTITUTO PRINCIPIA
TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

Filipe Campos Ribeiro

**Novas Fronteiras da Radioterapia:
FLASH-RT e Análise de Resultados em
Simulação Monte Carlo**

Orientadora:

Prof. Dra. Juliana Fernandes Pavoni

Coorientadores:

Bel. Victor Hugo Vasconcellos Nogueira Silva

Bela. Laiane Simões Mito

SÃO PAULO – SP

Julho de 2026

Novas Fronteiras da Radioterapia: FLASH-RT e Análise de Resultados em Simulação Monte Carlo

Filipe Campos Ribeiro¹, Laiane Simões Mito², Victor Hugo V. Nogueira Silva², Juliana Fernandes Pavoni²

¹ Escola de Talentos – Instituto Principia, Rua Pamplona, 145, São Paulo - SP

² Universidade de São Paulo, Av. Bandeirantes, 3900, Ribeirão Preto - SP

AGRADECIMENTOS

Este trabalho teve como inspiração a curiosidade em investigar as novas tecnologias da ciência que unem os princípios físicos de escalas incrivelmente pequenas ao propósito de salvar vidas. Esse trabalho e essa experiência só foram possíveis graças ao programa da Escola de Talentos do Instituto Principia, que há dois anos me proporciona oportunidades inimagináveis.

Portanto, agradeço sinceramente aos Professores Dr. Marcelo Guzzo e Dr. Ricardo Matheus por todo o apoio e acompanhamento e por dirigirem a Escola de Talentos com tamanho entusiasmo e notório afinho.

Meus agradecimentos aos Professores Dr. Ricardo Matheus, Dr. André Paschoal e Dr. Leonardo de Lima pela paciência e disposição e por todos os momentos durante as aulas e reuniões dos primeiros dois anos da Escola de Talentos.

Agradeço ao coordenador Welington Barbosa, que organiza todos os encontros e sempre os torna inesquecíveis, por ser a fonte de apoio de todos os alunos da Escola de Talentos. Agradeço à veterana Laura Maeda Shida, que, como minha mentora, me guiou e me tranquilizou durante esse processo a partir de suas experiências na instituição e como estudante universitária.

Meus sinceros agradecimentos à Professora Dra. Juliana Fernandes Pavoni, ao Victor Hugo Vasconcellos Nogueira Silva e à Laiane Simões Mioto pela atenção, o companheirismo, o tempo e o apoio durante o desenvolvimento deste trabalho. Suas orientações foram imprescindíveis, pois conferiram a este estudo maior critério acadêmico, além de me proporcionarem experiências e ensinamentos que levarei para o resto da minha jornada.

Agradeço aos meus amigos e colegas da Escola de Talentos, que foram fonte de inspiração e apoio e aos meus amigos de longa data, que sempre me incentivaram a seguir o caminho da ciência e que compartilham das minhas conquistas. Nesse sentido, agradeço especialmente ao João Gabriel Camargo da Mata pelo apoio durante o desenvolvimento do trabalho.

Agradeço à minha família, em especial, ao Ricardo Pavie Ribeiro, meu pai, à Evilen Campos, minha mãe, e ao Danilo Campos Ribeiro, meu irmão, por serem minha fonte eterna de inspiração e por toda a confiança e carinho ao longo de minha vida.

Resumo

A radioterapia FLASH (FLASH-RT) é uma nova modalidade de tratamento cuja viabilidade clínica vem sendo investigada desde a observação do efeito FLASH, isto é, o aumento da diferenciação da resposta do tecido saudável em relação ao tumor. Seu mecanismo biológico ainda não é completamente compreendido e algumas hipóteses tentam relacioná-lo à respostas imunes, ao sequestro de radicais livres e à depleção de oxigênio. Portanto, a fim de explorar e investigar a hipótese da depleção de oxigênio e coleta de radiais, foram conduzidas simulações com método Monte Carlo com base e referência em aplicações clínicas e protocolos de tratamento. **Metodologia:** as simulações foram feitas com o programa TOPAS e sua extensão TOPAS-nBio. Foram obtidos os espectros de energia de um feixe de elétrons de 12 MeV em sua profundidade de máxima dose em água e de um feixe de transmissão de prótons de 200 MeV na profundidade de 10 cm em água por meio de um espaço de fase. Então, com esse espaço de fase, irradiou-se uma caixa d'água micrométrica sob os regimes de taxa de dose convencional (CONV) e taxas de dose ultra-altas (FLASH) para gerar produtos de radiólise e calcular o valor G (número de espécies químicas geradas a cada 100 eV depositados no meio) dos produtos e, assim, analisar o consumo de O_2 e a cinética de produção de H_2O_2 no meio. A análise foi feita para três diferentes níveis de concentração de O_2 no meio: 5 μM , para simular tumor hipóxico; 40 μM , para simular tecido normóxico; e 250 μM , para simular células *in vitro*. **Conclusão:** os resultados foram satisfatórios, mostraram a ocorrência da hipóxia transitória e do efeito diferencial entre os ambientes de normóxia e hipóxia. Além disso, os dados possibilitaram uma análise e comparação da dependência e relação do consumo de O_2 e produção de H_2O_2 com os níveis de concentração de O_2 no meio.

Palavras-chave: FLASH-RT; radioterapia FLASH; efeito FLASH; taxas de dose ultra-altas; hipóxia transitória; Monte Carlo.

Abstract

FLASH radiotherapy (FLASH-RT) is a novel treatment modality whose clinical feasibility has been investigated since the observation of the FLASH effect, i.e., the enhanced differential response of healthy tissue relative to the tumor. Its biological mechanism is not yet fully understood, and several hypotheses attempt to relate it to immune responses, oxygen depletion, and radical scavenging. Therefore, to explore and investigate the oxygen depletion and radical scavenging hypothesis, Monte Carlo simulations were conducted based on clinical applications and treatment protocols. **Methodology:** The simulations were performed using the TOPAS software and its TOPAS-nBio extension. The energy spectra of a 12 MeV electron beam at its depth of maximum dose in water and a 200 MeV transmission proton beam at a depth of 10 cm in water were obtained through a phase space. Subsequently, using this phase space, a micro-metric water box was irradiated under conventional dose rate (CONV) and ultra-high dose rate (FLASH) regimes to generate radiolysis products and calculate the G-value (number of chemical species generated per 100 eV deposited in the medium) of the products, thereby analyzing O₂ consumption and H₂O₂ production kinetics in the medium. The analysis was performed for three different O₂ concentration levels in the medium: 5 μ M to simulate a hypoxic tumor, 40 μ M to simulate normoxic tissue, and 250 μ M to simulate in vitro cells. **Conclusion:** The results were satisfactory, demonstrating the occurrence of transient hypoxia and the differential effect between normoxic and hypoxic environments. Furthermore, the data enabled an analysis and comparison of the dependence and relationship of O₂ consumption and H₂O₂ production with the O₂ concentration levels in the medium.

Keywords: FLASH-RT; FLASH radiotherapy; FLASH effect; ultra-high dose rates; transient hypoxia; Monte Carlo.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	2
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	4
2.1	INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO IONIZANTE COM A MATÉRIA	4
2.1.1	<i>PARTÍCULAS CARREGADAS</i>	5
2.1.2	<i>FÓTONS</i>	9
2.1.3	<i>ATENUAÇÃO DE FÓTONS</i>	18
2.1.4	<i>LET</i>	22
2.2	RADIOBIOLOGIA	23
2.2.1	<i>RADIAÇÃO E RESPOSTA BIOLÓGICA</i>	23
2.2.2	<i>5 Rs DA RADIOTERAPIA</i>	26
2.3	MÁQUINAS DA RADIOTERAPIA	27
2.3.1	<i>TELECOBALTOTERAPIA</i>	27
2.3.2	<i>LINAC</i>	29
2.4	RADIOTERAPIA FLASH	31
2.4.1	<i>EFEITO FLASH</i>	31
2.4.2	<i>MECANISMO DE AÇÃO</i>	32
2.5	TECNOLOGIAS E PROJETOS PARA REALIZAÇÃO DE TRATAMENTOS FLASH	34
2.5.1	<i>DEFT</i>	35
2.5.2	<i>LWFA</i>	36
2.5.3	<i>PHASER</i>	37
2.6	FUTURO DA RADIOTERAPIA FLASH	39
3	METODOLOGIA	40
3.1	MONTE CARLO	41
3.2	SIMULAÇÕES	42
3.2.1	<i>ESPAÇO DE FASE</i>	43
3.2.2	<i>RADIÓLISE</i>	46
4	RESULTADOS	49
5	DISCUSSÕES	54
6	CONCLUSÃO	58

1 INTRODUÇÃO

Tudo começou com um experimento com um tubo de raios catódicos conduzido pelo físico alemão Wilhelm Conrad Röntgen, em Wurtzburgo, em 1895. Ele estava trabalhando com um tubo de Crookes coberto por uma blindagem de papelão preto, quando notou uma linha escura, que seria uma sombra, em um pedaço de papel com platino-cianeto de bário ao ligar a corrente. Após identificar esse fenômeno, investigou-o até concluir que era um tipo de radiação, até então desconhecido, e, portanto, chamou-a de raio X [1].

Em 1896, o físico francês Antoine Henri Becquerel, em seus experimentos, investigava as impressões nas chapas fotográficas oriundas da radiação emitida pelo sal de urânio, mas sem receber excitação alguma de radiação e mantido no escuro. Becquerel entendeu esse novo fenômeno de tal forma que essas radiações invisíveis, cujos efeitos eram análogos aos efeitos produzidos pelos raios X, poderiam ser radiações emitidas por fosforescência, mas cujo período de atividade era muito maior do que aquele das luminosas emitidas pela mesma substância. Até abandonar esse estudo, Becquerel acreditava que esse fenômeno era semelhante à luz, pois se refletia e se refratava, diferentemente dos raios X, e que era alguma forma de fosforescência invisível. Além disso, Becquerel percebeu que o urânio metálico também emitia essa radiação, mas preferiu considerá-la uma exceção à aprofundar-se nos estudos. Assim, esse campo de estudo permaneceu estagnado por muito tempo, pois muitas das conclusões e resultados experimentais de Becquerel não eram condizentes com a realidade e não foram observados em experimentos conduzidos por outros cientistas [2].

Em 1898, na França, Marie Curie se propôs a encontrar outros materiais que emitissem a mesma radiação do urânio. Em abril do mesmo ano, com o uso de uma câmara de ionização, descobriu que o tório era um desses materiais. Assim, ao perceber que o fenômeno não era único ao urânio metálico, Curie passou a chamar de radioativas as substâncias que emitiam raios Becquerel. Notoriamente, Curie indagou-se a respeito de um fato um tanto quanto estranho: a pechblenda (ou uraninita) e a calcolita (ou torbernita), que são dois minerais de urânio, são muito mais ativos do que o urânio puro. Isso a levou à suposição de que haveria outro elemento ali que, puro, seria mais radioativo que o urânio [2].

Posteriormente, em esforços para descobrir o que seria esse novo elemento, separou os constituintes da pechblenda e obteve um material unido ao bismuto que era 400 vezes mais ativo do que o urânio puro. Curie, então, sugeriu que esse material fosse chamado de polônio, em lembrança ao seu país de origem, Polônia. Após o trabalho sobre o polônio, Marie Curie questiona a existência da reflexão, refração e polarização afirmadas por Becquerel sobre os raios de Becquerel e, com base nos estudos de Elster e Geitel, nega a intensificação da radioatividade pela exposição ao Sol. Além disso, chamando a atenção para o fato de que os elementos radioativos eram os de maior número atômico, ela defendia que a radioatividade era uma propriedade atômica. Posteriormente, Marie e Pierre Curie descobriram o rádio, que é mais radioativo que o polônio [2].

Após as descobertas dos raios X e da radioatividade, os médicos e pesquisadores começaram a perceber que a exposição à radiação causava diversos tipos de danos. Em 1897, T.C. Gilchrist publicou um relato de 23 casos de danos causados pela exposição excessiva aos raios X. Outro caso marcante foi o do médico brasileiro Álvaro Alvim, que faleceu em 1928 após ter suas duas mãos amputadas devido às lesões causadas pela exposição às radiações. Logo, percebeu-se que a radiação causava respostas biológicas e que poderia ser utilizada como forma de tratamento contra o câncer. Assim, dispositivos rudimentares como bombas de rádio e cobalto foram criados com o intuito medicinal da radiação. No entanto, esses tratamentos careciam seriamente de mecanismos de proteção ao tecido saudável, visto que o conhecimento acerca da dosimetria e de outros mecanismos de tratamento estava em processo de desenvolvimento inicial. Nessa época, a Braquiterapia, em que pequenas cápsulas, de formatos variados, contendo rádio eram colocadas em contato com o tumor, foi muito praticada e a radioterapia era feita com doses únicas e sem protocolos bem estabelecidos. Portanto, apesar de curar doenças até então incuráveis, danos severos a curto e a longo prazo ao tecido saudável eram muito frequentes [3, 4].

Em 1920, Henri Coutard e Claudius Regaud demonstraram a maior eficiência da radioterapia com o fracionamento das doses em preservar o tecido saudável dos pacientes, comparada à radioterapia de dose única, que foi amplamente utilizada em seus primeiros anos. O tratamento com o fracionamento de dose ocorria de tal modo que as frações deveriam ser de quantidades iguais, e o período de tratamento deveria ser predeterminado a fim de estabelecer uma dose total e suas frações. A lógica do valor de cada dose é a seguinte: se for muito alta, a toxicidade ao tecido saudável será excessiva e, se for muito baixa, não haverá um controle tumoral satisfatório. Para maior segurança e eficácia, as doses alcançáveis eram baixas e o tratamento era seguido à risca, exceto quando os acompanhamentos clínicos indicavam que fosse preciso aumentar ou diminuir o período do tratamento ou o valor das doses [5].

Com o tempo, surgiram os aceleradores lineares (LINACs), que possibilitaram tratamentos mais avançados com raios X e com feixe de elétrons, e foram substituindo gradativamente as bombas de cobalto, que eram mais compactas e acessíveis. Quando a vantagem física do uso de feixes de íons pesados na radioterapia foi descoberta, máquinas capazes de acelerar prótons (ciclotrons e síncrotrons) para uso clínico foram criadas, o que constituiu um grande avanço na ciência, que tinha como pilar os princípios de Henri Coutard.

Os tratamentos com LINAC são feitos tanto com feixe de elétrons quanto com feixe de fótons. Para o tratamento com feixe de fótons, a máquina acelera um feixe de elétrons, que é, então, direcionado a um alvo de conversão para a produção de raios X. Para o tratamento com feixe de elétrons, em vez de haver um alvo de conversão, há uma lâmina de espalhamento, cuja função é alargar o feixe. Ao final do caminho percorrido, é posto um filtro aplainador, o qual atenua e uniformiza o feixe para o tratamento, mas também reduz a taxa de dose entregue. Posteriormente, com o desenvolvimento de novas modalidades, como a radioterapia de intensidade modulada (IMRT) e a radioterapia estereotáxica (SRT), surgiu o interesse nos tratamentos sem

o filtro aplainador, que permitia o uso de doses não uniformes e de maiores taxas de dose [6]. Por exemplo, o LINAC TrueBeam (Varian) [7] opera, com um feixe de fótons, com uma taxa de dose máxima de 600 UM/min (unidades monitoras por minuto) com o filtro aplainador e de 2400 UM/min sem, as quais correspondem à, respectivamente, 0,1 Gy/s e 0,4 Gy/s, para uma calibragem de 1 cGy/UM.

A radioterapia convencional, que utiliza baixas taxas de dose e usufrui do princípio do fracionamento de dose, era vista como insubstituível até que, em 2014, o Dr. Vincent Favaudon provou o contrário [8]. Em seu estudo, Favaudon tratou um rato com câncer de pulmão com uma taxa de dose ultra-alta (≥ 40 Gy/s) em apenas 90 ms. O resultado observado, em relação à radioterapia convencional, foi um controle tumoral similar e uma redução considerável nos efeitos a curto e longo prazo nos tecidos saudáveis do murino. Desde então, a radioterapia com taxas de dose ultra-altas, conhecida como radioterapia FLASH, ganhou espaço no meio acadêmico. Embora os mecanismos biológicos responsáveis pelo efeito FLASH não sejam inteiramente compreendidos, a principal hipótese é a do sequestro de radicais livres pelos agentes antioxidantes e da depleção de oxigênio, após a irradiação, associada à recombinação e ao aniquilamento dos radicais. Esses fenômenos poderiam diminuir a fixação dos danos causados ao tecido saudável, preservando, ao mesmo tempo, a eficácia terapêutica sobre o tumor.

A fim de explorar com mais afinco o efeito FLASH e, especialmente, a hipótese do sequestro de radicais livres e da depleção de oxigênio, foram conduzidas simulações com o método Monte Carlo, com base e referência em aplicações clínicas e protocolos de tratamento.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO IONIZANTE COM A MATÉRIA

A radiação ionizante é toda radiação capaz de ionizar os átomos do meio que atravessa. Assim, durante um tratamento de radioterapia, a deposição de energia ocorre por meio da ionização e da excitação dos materiais do meio, devido às diversas interações entre as partículas. Os livros utilizados como base e referência nessa seção são os livros "Física das Radiações", de Emico Okuno e Elisabeth Yoshimura [9], e "Física da Radioterapia", de Luiz A.M. Scaff [10].

As radiações ionizantes são classificadas em diretamente ionizantes e indiretamente ionizantes. As diretamente ionizantes, como elétrons, prótons e partículas alfa, são caracterizadas por possuírem carga elétrica e esse detalhe impacta a forma como elas interagem com o meio, que é por meio da força coulombiana. Por outro lado, as indiretamente ionizantes, como os fótons (raios X e raios gama) e os nêutrons, não possuem carga elétrica. Então, os fótons, por exemplo, interagem com o meio produzindo partículas carregadas secundárias, que são as responsáveis pelas ionizações.

2.1.1 PARTÍCULAS CARREGADAS

A interação das partículas carregadas com o meio ocorre por meio da força coulombiana. No entanto, o feixe de partículas ao penetrar no meio, diferentemente do feixe de fótons, não diminui em quantidade, mas sim em energia média das suas partículas. Nesse sentido, após cada tipo de colisão, as partículas carregadas transferem sua energia ao meio, depositando dose nele. Consequentemente, o feixe perde energia progressivamente à medida que atravessa o material, sendo atenuado.

Essas interações podem ser classificadas de acordo com o alvo envolvido, elétrons ou núcleos atômicos, e com a quantidade de energia transferida em cada evento. A colisão suave, ou inelástica com o átomo, ocorre quando a partícula interage com o átomo por inteiro ou com as camadas eletrônicas de maior E_{lig} . Aqui, a partícula carregada perde pouca energia, é pouco defletida e causa, geralmente, apenas excitação, e raramente ionização. Na colisão dura, ou inelástica com e^- fortemente ligado, ocorre uma colisão frontal da partícula carregada com um e^- de camada interna. Aqui, ocorre a ionização do átomo, há grande perda de energia e, caso o e^- ejetado tenha energia cinética suficiente para sair da trajetória da partícula incidente, ele é chamado de raio delta e pode causar outras ionizações em áreas adjacentes. Na colisão elástica com o núcleo, a partícula sofre uma grande deflexão ao se aproximar do núcleo, mas sem perda de energia. Por outro lado, na colisão inelástica com o núcleo, ocorre a deflexão da partícula e há grande perda de energia, que é transformada em raios X de freamento. A aniquilação do pósitron acontece quando um pósitron com baixa energia cinética se aniquila com um e^- em repouso. Caso o pósitron seja aniquilado em velocidade, dá-se o nome de aniquilação em voo. Por fim, as reações nucleares ocorrem quando a partícula incidente interage diretamente com o núcleo ou algum nucleon (constituente do núcleo) individualmente. Na radioterapia, essa interação ocorre com pouquíssima frequência, uma vez que é predominante na escala de GeV.

A seção de choque, ou probabilidade da ocorrência, de cada interação acima depende da velocidade, massa e carga da partícula incidente e, também, do parâmetro de impacto, que diz respeito à distância da trajetória da partícula ao centro das forças atuantes sobre ela.

A perda de energia das partículas carregadas é quantificada pelo poder de freamento (*stopping power*). O poder de freamento diz respeito à média de energia perdida por unidade de distância percorrida, sendo uma ponderação da perda de energia cinética de cada partícula (ΔK) para cada tipo de interação, pela probabilidade de cada interação ocorrer. Ele é representado por S ou $\frac{dE}{dx}$ [$\text{MeV} \cdot \text{cm}^{-1}$] e o poder de freamento mássico, que normaliza o valor pela densidade do meio, é representado por s ou $\frac{dE}{\rho dx}$ [$\text{MeV} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{g}^{-1}$].

Além disso, as expressões do poder de freamento das partículas carregadas pesadas (PCP) são distintas das expressões do poder de freamento das partículas carregadas leves (PCL). Isso se dá principalmente pela diferença de massa entre as PCL e as PCP. Por um lado, as partículas pesadas, como os prótons, ao interagirem com os elétrons do meio, sofrem menos deflexões e perdem menos energia, o que resulta em um feixe cuja trajetória é próxima à sua

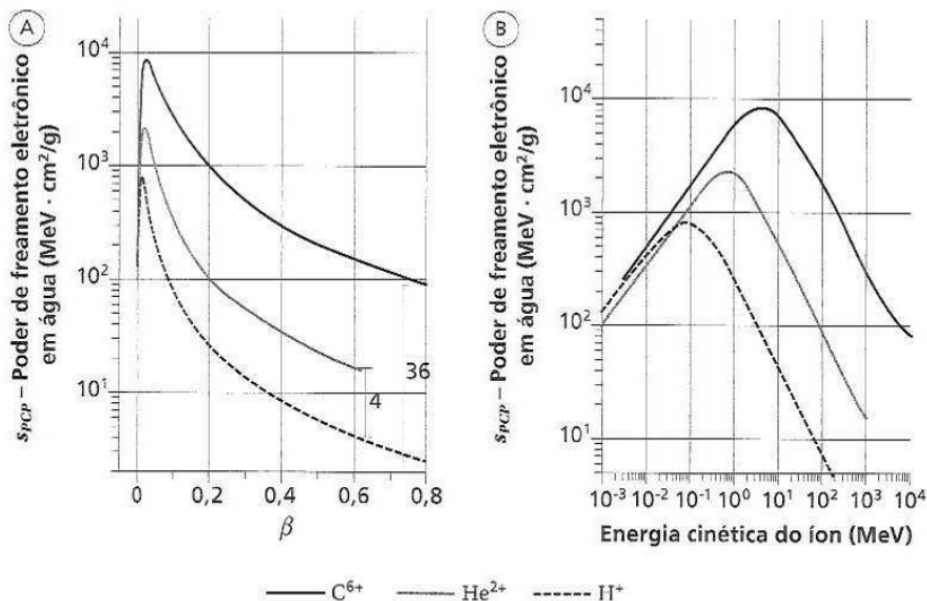
direção inicial ao longo do trajeto. Por outro lado, as partículas leves, como os elétrons, ao interagirem com os elétrons do meio, perdem mais energia e são mais defletidas, o que resulta em um caminho tortuoso.

Para o poder de freamento de partículas carregadas pesadas (PCP), são consideradas apenas as colisões suave e dura, exceto para energias muito baixas, em que se considera também a colisão elástica com o núcleo. Os choques ocorrem de forma contínua até a energia cinética da radiação se aproximar da energia de agitação da temperatura ambiente. Não há expressão analítica que descreva o poder de freamento de PCP, pois existem dificuldades em relação ao cálculo da perda de energia e da mudança de carga ao longo do trajeto. Para minimizar o problema quanto à mudança de carga, define-se uma carga efetiva da partícula, que diminui à medida em que o íon perde energia cinética. Apesar de não haver expressão analítica, a equação (2.1) representa uma aproximação do poder de freamento mássico por colisão (s_C) para um caso de carga fixa do íon (ze) e velocidade da partícula (βc) muito maior que a velocidade dos elétrons nas camadas eletrônicas. Portanto, ela é falha para baixas energias. A unidade de medida obtida é $[\text{MeV} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{g}^{-1}]$.

$$s_C = 0,3071 \frac{Z}{A} \left(\frac{z}{\beta} \right)^2 \left[13,8373 + \ln \left(\frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 - \ln I - \frac{C}{Z} \right], \quad \text{sendo} \quad \beta = \frac{v}{c} \quad (2.1)$$

em que C é o poder de freamento por colisão, Z é o número atômico, A é a massa atômica, I é o potencial de excitação médio do átomo, ze e β são, respectivamente, a carga e a razão entre a velocidade da partícula (v) e a velocidade da luz (c).

Figura 2.1: (A) Poder de freamento mássico eletrônico em relação à velocidade (βc) para próton, partícula alfa e íon de carbono incidentes em água. (B) Mesmo poder de freamento, mas em função da energia cinética dos íons.

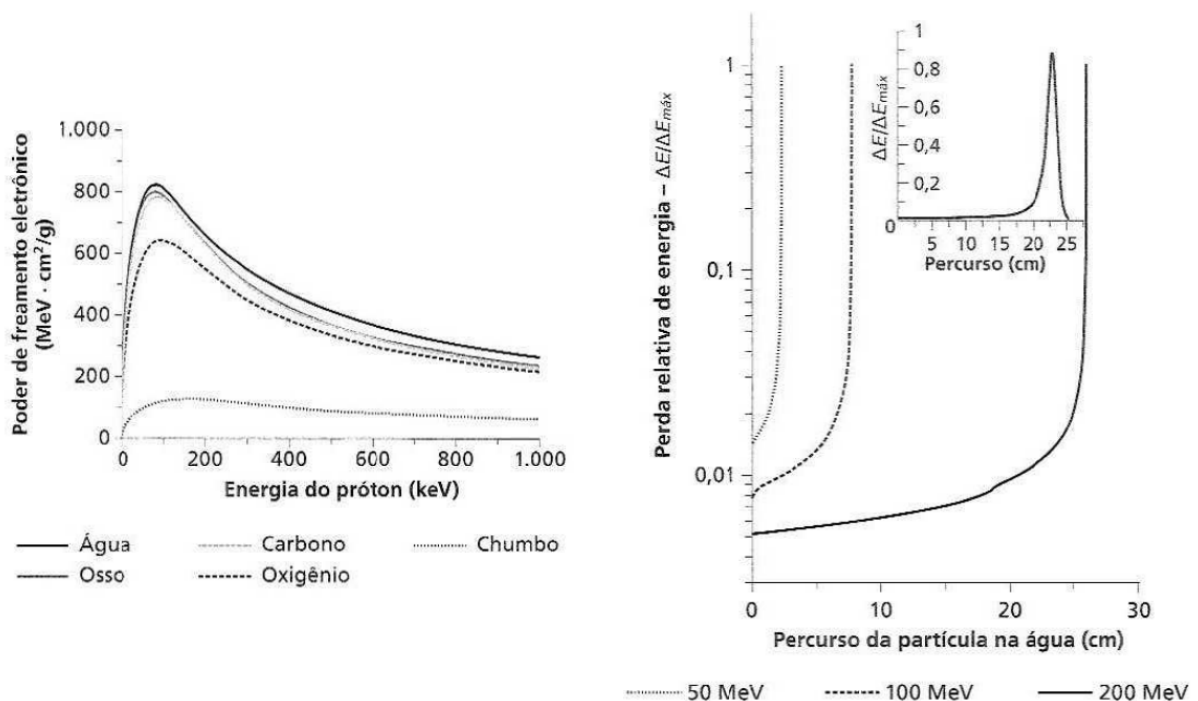


Fonte: Livro "Física das Radiações"[9].

Decorre-se da equação (2.1) que não há dependência em relação à massa da partícula, ou seja, íons de diferentes massas, mas com velocidades e cargas idênticas, possuem o mesmo poder de freamento. Além disso, o poder de freamento decresce com o aumento do número atômico do material e cresce com o quadrado da carga da partícula. O impacto da última observação recai, principalmente, sobre o alcance da partícula (quanto maior a carga, menor o alcance).

O comportamento de entrega de dose pelos feixes de PCP não é uniforme ao longo de todo o seu trajeto. Em razão do poder de freamento de PCP ser inversamente proporcional à energia do feixe, próximo ao final da trajetória do feixe, há um pico de dose, onde se deposita a maior parte da energia, que recebe o nome de pico de Bragg (*Bragg Peak*). Com base no gráfico de poder de freamento mássico em função da velocidade das partículas (Figura 2.1), percebe-se que o s_{PCP} aumenta à medida que a velocidade das partículas diminui. Assim, à medida que a partícula atravessa o meio e perde energia cinética, seu poder de freamento aumenta.

Figura 2.2: Gráfico da esquerda: poder de freamento mássico eletrônico em função da energia de prótons incidentes em água, osso compacto, grafite (carbono), oxigênio e chumbo. Valores obtidos da base de dados PSTAR. Gráfico da direita: perda relativa de um único próton em três energias diferentes em função do percurso na água. O gráfico menor representa a perda relativa de energia de um feixe de prótons de 200 MeV.

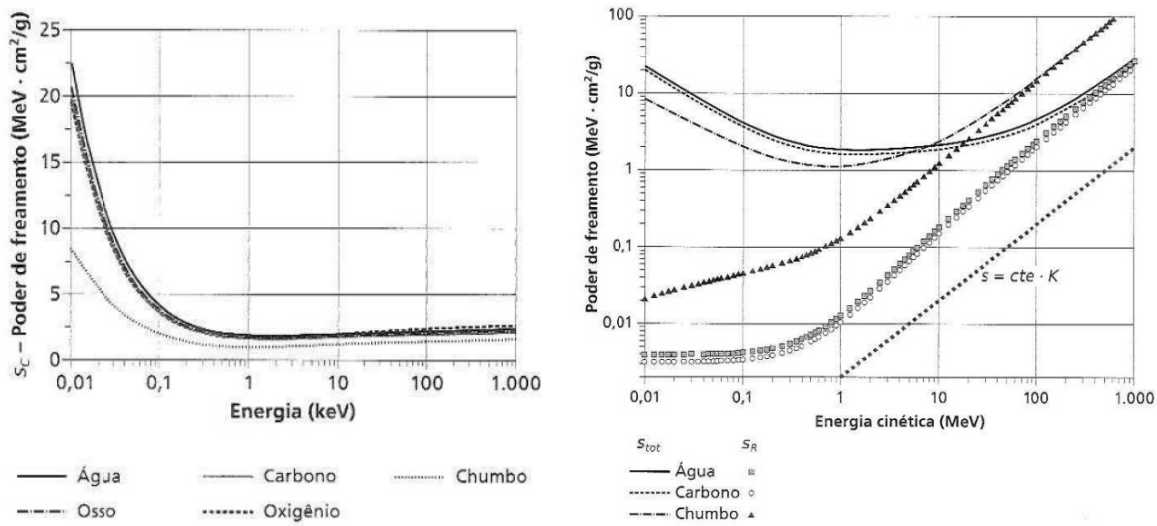


Fonte: Livro "Física das Radiações"[9].

As partículas leves, cujo exemplo principal na radioterapia é o elétron, atingem altíssimas velocidades com maior facilidade do que as partículas pesadas e, por isso, é necessário atribuir uma análise relativística ao seu estudo, o que implica um grau de complexidade maior.

Ademais, os processos radiativos ¹ ganham mais importância. Portanto, o poder de freamento é dividido em s_R e s_C para separar os processos radiativos das colisões, respectivamente. O poder de freamento do elétron e o do pósitron são levemente diferentes. Isso deve-se ao efeito de troca, em que o elétron, ao sofrer uma colisão dura com outro da mesma espécie (outro elétron), só pode transferir até metade de sua energia cinética para uma partícula diferente, mas de mesma massa. No entanto, essa diferença é pequena e geralmente não é considerada.

Figura 2.3: Imagem à esquerda: Gráfico do poder de freamento mássico por colisão (s_C) para elétrons incidindo em água, osso, carbono, oxigênio e chumbo em função da energia. Imagem à direita: Gráfico do poder de freamento mássico por radiação (símbolos) e do poder de freamento mássico total (linhas) para elétrons incidentes em água, carbono e chumbo em função da energia da partícula. A linha pontilhada $s = cte \cdot K$ mostra uma dependência linear com a energia. Valores de ambos os gráficos obtidos com a base de dados ESTAR.



Fonte: Livro "Física das Radiações"[9].

Pela Figura 2.3, percebe-se que s_C diminui acentuadamente para valores intermediários de energia e, para altas energias, cresce lentamente. Apesar desse comportamento de aumento do poder de freamento com a perda de energia cinética, não ocorre nenhum pico de Bragg. Isso deve-se ao fato de que as trajetórias dos elétrons são espalhadas, tendo em vista as grandes deflexões. Assim, a deposição de dose ocorre de forma mais homogênea, diferentemente da dose depositada por prótons, cujo feixe possui menor espalhamento de partículas ao longo do caminho no meio irradiado.

O poder de freamento por radiação representa a energia cinética perdida na produção de raios X de freamento por unidade de distância percorrida e é dado por:

$$s_R = \left(\frac{dE}{\rho dx} \right)_R = 5,8 \cdot 10^{-28} \cdot \frac{N_A Z^2}{A} (K + m_e c^2) \bar{B}_R \quad (2.2)$$

em que K é a energia cinética do e^- , Z e A são, respectivamente, o número atômico e a massa

¹Processos radiativos estão relacionados à produção ou absorção de radiação eletromagnética após uma interação.

atômica do meio, $\bar{B}_R$ é uma função lentamente crescente de K e de Z e a unidade de medida de s_R é $[\text{MeV} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{g}^{-1}]$.

Pela Figura 2.3, percebe-se que as relações de s_C com Z (Figura 2.4) e com a energia (Figura 2.3) são majoritariamente decrescentes, enquanto as de s_R com Z (Figura 2.4) e com a energia (Figura 2.3) são crescentes. Essa diferença de comportamento de s_R e s_C com a energia implica uma predominância de um sobre o outro para determinadas regiões de energia. De uma forma visual, pode-se perceber a predominância das colisões e das perdas por produção de radiação pelo gráfico na Figura 2.4, em que a divisória é delimitada pelas energias em que $s_R = s_C$.

Essa análise também pode ser feita por meio da determinação de y , que é a contribuição de s_R para o poder de freamento total ($s_T = s_R + s_C$):

$$y = \frac{s_R}{s_R + s_C} = \frac{S_R}{S_R + S_C} \quad (2.3)$$

em que y é a fração da energia cinética perdida que foi transferida em forma de raios X de freamento. Contudo, isso é para cada energia de elétron. Então, para obter um valor médio de y que represente o rendimento de radiação produzida ao longo de todo o caminho (Y), utiliza-se a seguinte expressão:

$$Y = \bar{y} = \frac{1}{K_0} \int_0^{K_0} y(K) dK \quad (2.4)$$

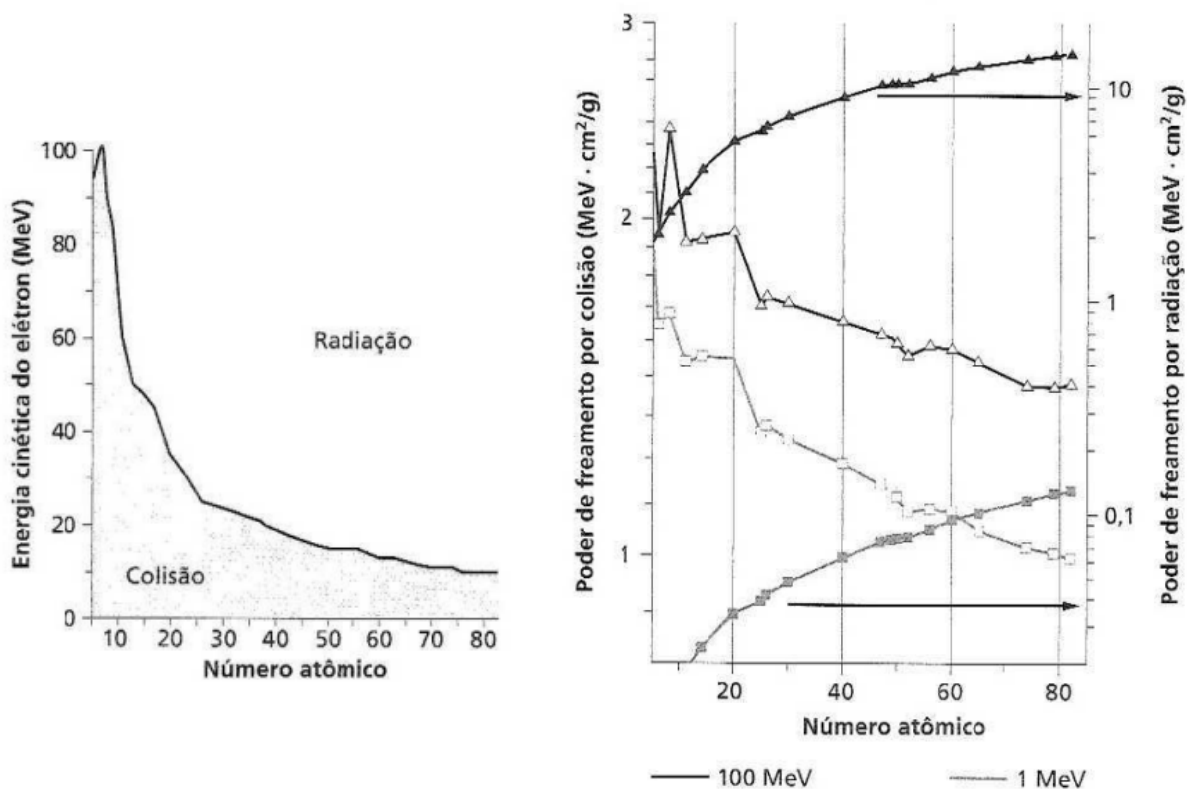
em que K_0 é a energia cinética inicial, K é a energia cinética do elétron no intervalo $[0, K_0]$ e y é a contribuição do poder de freamento por radiação para cada valor de K . Em decorrência do aumento de s_R com a energia, o rendimento Y também é crescente com a energia, de maneira quase linear.

2.1.2 FÓTONS

Aqui, os dois tipos de radiações ionizantes que serão consideradas são os raios X e os raios γ . A principal diferença entre essas duas radiações está em sua origem. Enquanto os raios X são produzidos a partir de eventos na eletrosfera do átomo, os raios γ necessariamente são produzidos em produção de pares ou em decaimentos radioativos.

Para a produção de raios X, usa-se um esquema em que um alvo de alto ponto de fusão e elevado número atômico, geralmente o tungstênio (W) ou o molibdênio (Mo), é bombardeado por elétrons que tem origem em um cátodo e são acelerados por uma fonte de tensão que opera em ordens de quilovoltagem. Quando esses elétrons atingem o alvo, a produção de raios X pode ocorrer de duas formas: pela desaceleração do elétron incidente, causada pela atração eletrostática do núcleo (radiação de freamento); ou pela interação com os átomos do alvo, resultante do salto quântico de um elétron de uma camada mais externa para preencher a lacuna deixada por um elétron ejetado (radiação característica).

Figura 2.4: Imagem à esquerda: Regiões de predominância de perdas por colisão e por radiação. A curva representa os valores de energia e número atômico em que $s_R = s_C$. Imagem à direita: Gráfico do poder de freamento mássico por colisão (símbolos vazios, escala à esquerda) e por radiação (símbolos cheios, escala à direita) para elétrons de energias de 1 MeV (quadrados) e 100 MeV (triângulos) em função do número atômico do meio. Valores obtidos da base de dados ESTAR.



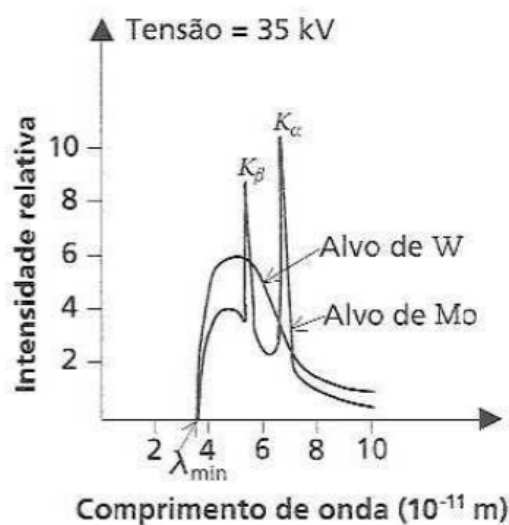
Fonte: Livro "Física das Radiações"[9].

No primeiro caso, os fótons produzidos são chamados de raios X de freamento ou de *Bremsstrahlung*, possuem um espectro contínuo e sua energia independe do material do meio, mas depende do grau de deflexão de sua trajetória e da energia do elétron incidente. No segundo e último caso, os fótons são chamados de característicos justamente por apresentarem um espectro característico do átomo de onde o elétron foi ejetado. A energia do fóton será a diferença entre a energia total do elétron na camada mais externa (inicial) e a energia total na camada mais interna (final).

Um detalhe importante é que, caso os elétrons incidentes tenham energia cinética maior ou igual à energia de ligação das camadas eletrônicas internas do alvo, pode ocorrer a produção simultânea de raios X de freamento e característicos. A intensidade da radiação de freamento cresce em função do aumento da tensão de aceleração, um comportamento intrínseco à sua natureza de espectro contínuo, diferentemente da radiação característica.

Os raios γ tem origem em um decaimento nuclear, quando um núcleo ainda se encontra excitado após a emissão de um decaimento alfa ou beta. Quando esse processo acontece, não ocorre transmutação e a energia do fóton emitido é a diferença entre dois níveis de energia do

Figura 2.5: Espectro de raios X de 35 kV com alvo de molibdênio (Mb) e com alvo de tungstênio (W).



Fonte: Livro "Física das Radiações"[9].

núcleo ($h\nu$), que pertence a um espectro característico do radionuclídeo, com valores discretos. Eles também podem ser gerados em processos de aniquilação de pares, quando uma partícula e sua antipartícula interagem, de forma a se aniquilarem, e suas energias de repouso e cinética são integralmente convertidas em radiação eletromagnética (raios γ).

A seção de choque para fótons, ou a probabilidade de interação dos fótons com o meio, depende principalmente da energia do fóton incidente e das propriedades do meio, como o número atômico efetivo. Nesse viés, o conhecimento da seção de choque será de fundamental valor para o estudo da atenuação linear dos feixes, uma vez que elas estão diretamente relacionadas ao coeficiente de atenuação linear, que caracteriza a redução da intensidade do feixe à medida que este atravessa um material.

Nas energias de feixes usados na Física Médica, apenas quatro interações são consideradas relevantes para os tratamentos: espalhamento coerente, efeito Compton, efeito fotoelétrico e produção de pares. Assim, cada interação tem sua seção de choque e, a soma de suas contribuições resulta na seção de choque total, que determina a probabilidade global de interação dos fótons no meio.

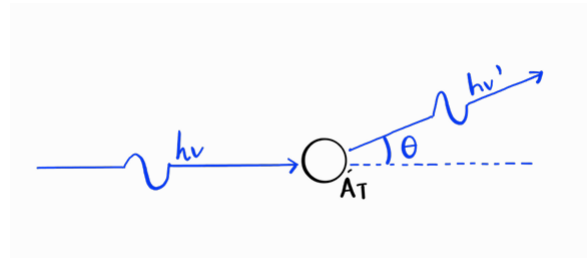
O espalhamento coerente, ou espalhamento Rayleigh, é uma interação do fóton incidente com o átomo do material como um todo. Isso ocorre de maneira que o fóton, geralmente em baixas energias, interage com a nuvem eletrônica do átomo e é redirecionado com energia praticamente igual à inicial em outra direção. Por conservação de momento, o núcleo sofre um pequeno recuo, mas quase nenhuma energia é transferida ao átomo e, por tal motivo, considera-se que não há transferência de energia para o meio.

O número atômico Z e a energia do fóton ($h\nu$) influenciam a frequência e o ângulo de espalhamento de forma que as maiores deflexões tendem a ocorrer para Z mais elevados e

energias mais baixas, mas a direção de espalhamento normalmente é muito próxima à direção incidente. A relação da seção de choque do espalhamento coerente é dada por:

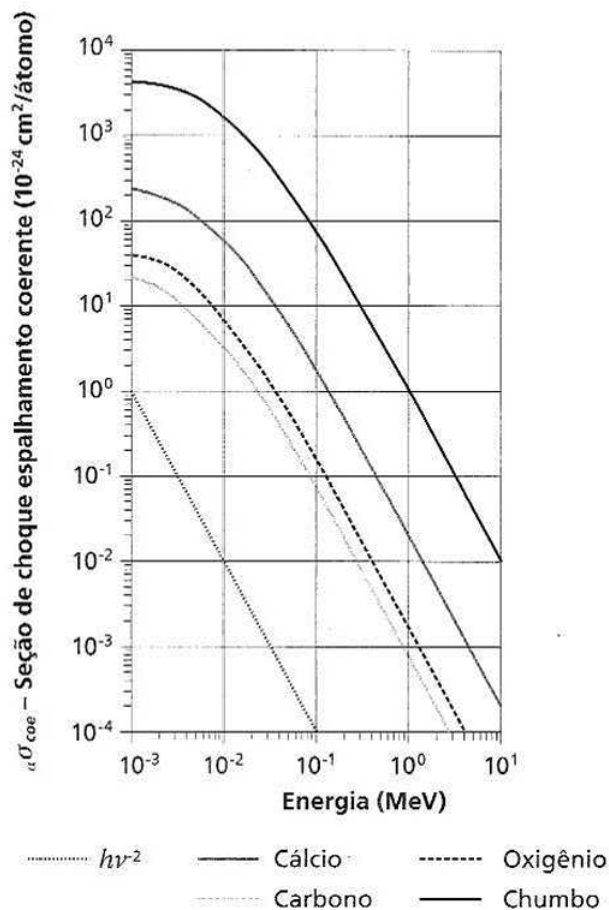
$$\sigma_{co} \propto \left(\frac{Z}{h\nu} \right)^2 \quad (2.5)$$

Figura 2.6: Esquema do espalhamento coerente.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 2.7: Gráfico da seção de choque do espalhamento coerente para cálcio, carbono, oxigênio e chumbo. A reta em linha pontilhada indica variação com potência (-2) de $h\nu$. Valores obtidos a partir da base de dados XCOM.



Fonte: Livro "Física das Radiações"[9].

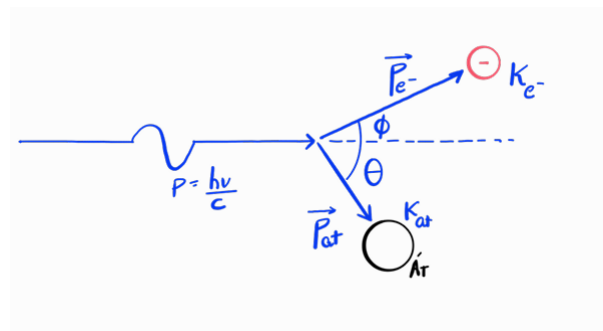
O efeito fotoelétrico é uma interação do fóton com o átomo do meio, em que o fóton é completamente absorvido pelo átomo e, com a ejeção de um elétron de sua camada, uma pequena parcela da energia é transformada em energia cinética do átomo.

Para o efeito fotoelétrico, dado o esquema na Figura 2.8, valem as seguintes relações segundo às leis de conservação de energia e momento linear:

$$\frac{h\nu}{c} = p_{e^-} \cos \theta + p_{at} \cos \phi \quad (2.6)$$

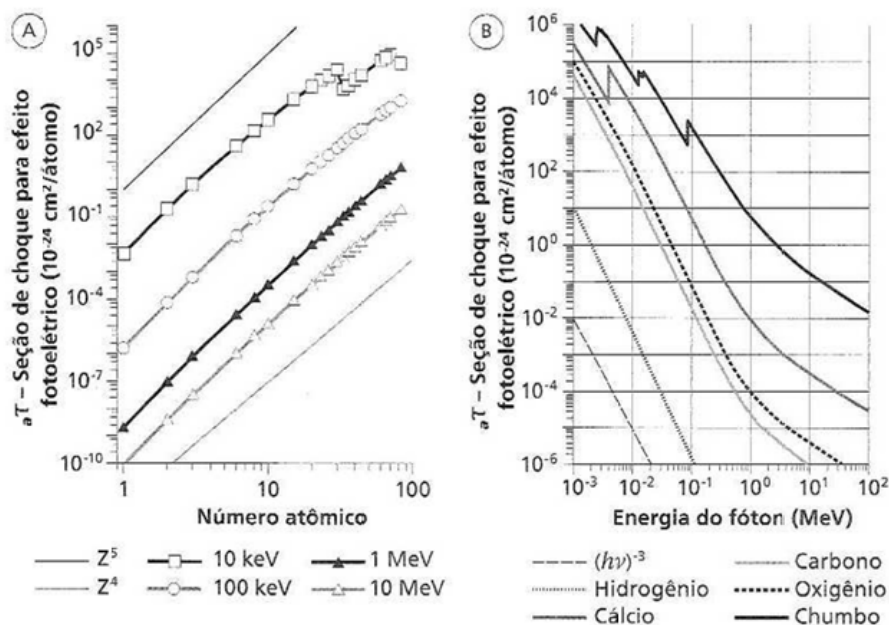
$$h\nu = K_{e^-} + K_{at} + E_{lig} \quad (2.7)$$

Figura 2.8: Esquema do efeito fotoelétrico.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 2.9: Gráficos da seção de choque para efeito fotoelétrico em função do número atômico para algumas energias de fóton incidente (A) e em função da energia do fóton para alguns elementos químicos (B). Valores obtidos a partir da base de dados XCOM.



Fonte: Livro "Física das Radiações"[9].

Após a ejeção do elétron, o íon se desexcita pela emissão de raios X característicos ou elétrons Auger. Estes últimos são elétrons, geralmente vindos da mesma camada ou de uma mais externa do que a daquele que preencheu a lacuna interna, que recebem a diferença de energia do salto quântico e são ejetados do átomo.

Nota-se também que as escalas de energia aqui tratadas são muito maiores do que aquelas observadas no efeito fotoelétrico explicado por Einstein. A diferença é simplesmente que o efeito fotoelétrico na radioterapia acontece com maior frequência nas camadas mais internas da eletrosfera.

A seção de choque do efeito fotoelétrico não é descrita analiticamente, pois obtê-la envolve uma elevada complexidade. Por tal razão, utilizam-se extrapolações numéricas a partir de resultados experimentais. Na Figura 2.9, percebe-se a relação diretamente proporcional da seção de choque atômica com o número atômico Z e, também, a relação inversa dela com a energia do fóton. Cabe destacar que as descontinuidades e picos no gráfico em função da energia estão associados às energias de ligação (E_{lig}) de camadas cada vez mais internas.

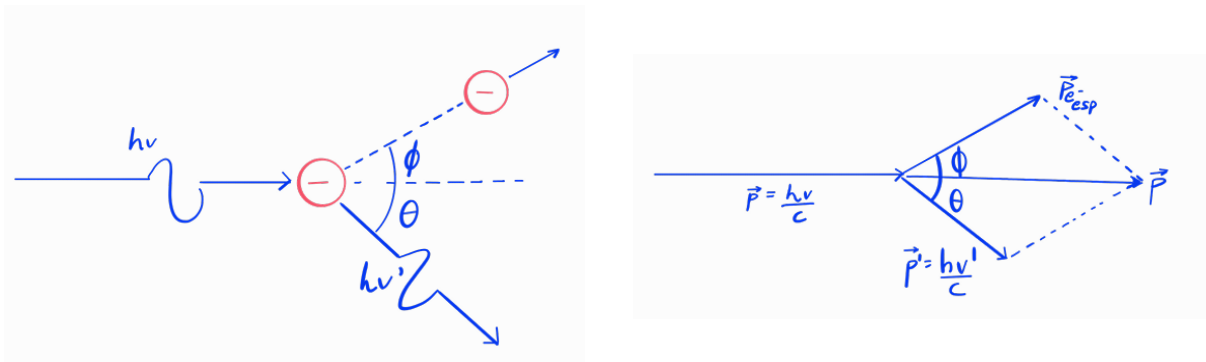
A distribuição angular dos elétrons liberados pelo fóton mostra que, para energias crescentes, a deflexão em relação à direção do fóton incidente diminui. Por outro lado, a deflexão é quase perpendicular para energias menores, pois essa é a direção do campo elétrico associado ao fóton.

O efeito Compton, ou espalhamento inelástico, é uma colisão direta entre o fóton incidente e um elétron livre ² da camada de valência de um átomo do meio. O fóton é absorvido e reemitido em outra direção e há grande transferência de energia ao elétron, dada por:

$$K_{e^-} = h(\nu - \nu') \quad (2.8)$$

em que K_{e^-} e $h(\nu - \nu')$ representam, respectivamente, a energia cinética do elétron ejetado e a diferença entre a energia do fóton incidente ($h\nu$) e a energia do fóton reemitido ($h\nu'$).

Figura 2.10: Imagem à esquerda: Esquema do efeito Compton. Imagem à direita: Representação dos momentos no efeito Compton.



Fonte: Elaborado pelo autor.

²Nesse caso, o elétron é considerado livre quando $h\nu \gg E_{lig}$, em que E_{lig} é a energia de ligação do elétron.

Seguem da Figura 2.10 as seguintes relações de conservação de energia e momento linear:

$$\frac{h\nu'}{c} \sin\theta = p \sin\phi \quad \text{e} \quad \frac{h\nu}{c} = p \cos\phi + \frac{h\nu'}{c} \cos\theta \quad (2.9)$$

Ao adotar a relação relativística de momento linear $p = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$ e definir $\alpha = \frac{h\nu}{m_e c^2}$, tem-se:

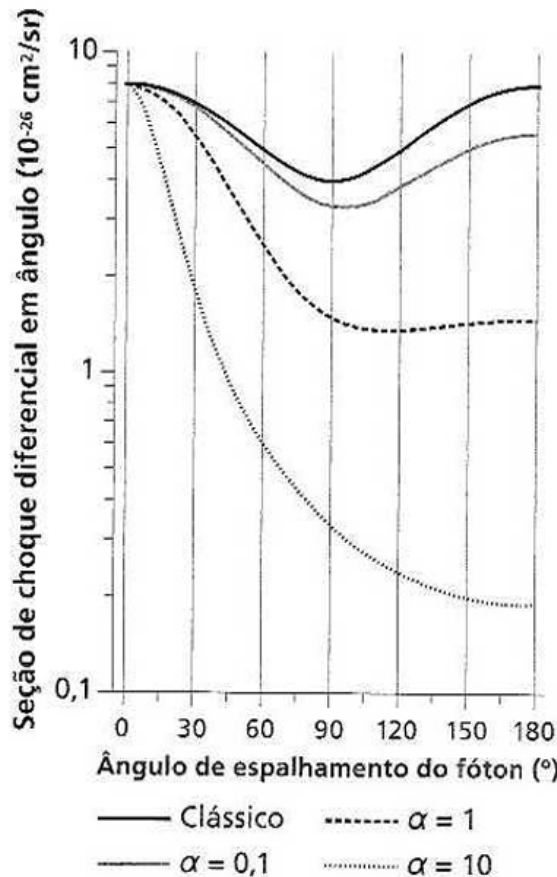
$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \alpha(1 - \cos\theta)} \quad (2.10)$$

Como observação adicional, depreende-se da equação (2.5) que, caso haja retroespalhamento ($\theta = 180^\circ$), a energia do fóton não se anula, possuindo valor:

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + 2\alpha} \quad (2.11)$$

Isso mostra que, no efeito Compton, o fóton sempre será espalhado e o fóton incidente nunca será absorvido em sua totalidade.

Figura 2.11: Gráfico da seção de choque diferencial em ângulo de acordo com Klein e Nishina para diferentes valores de $\alpha = \frac{h\nu}{m_e c^2}$.

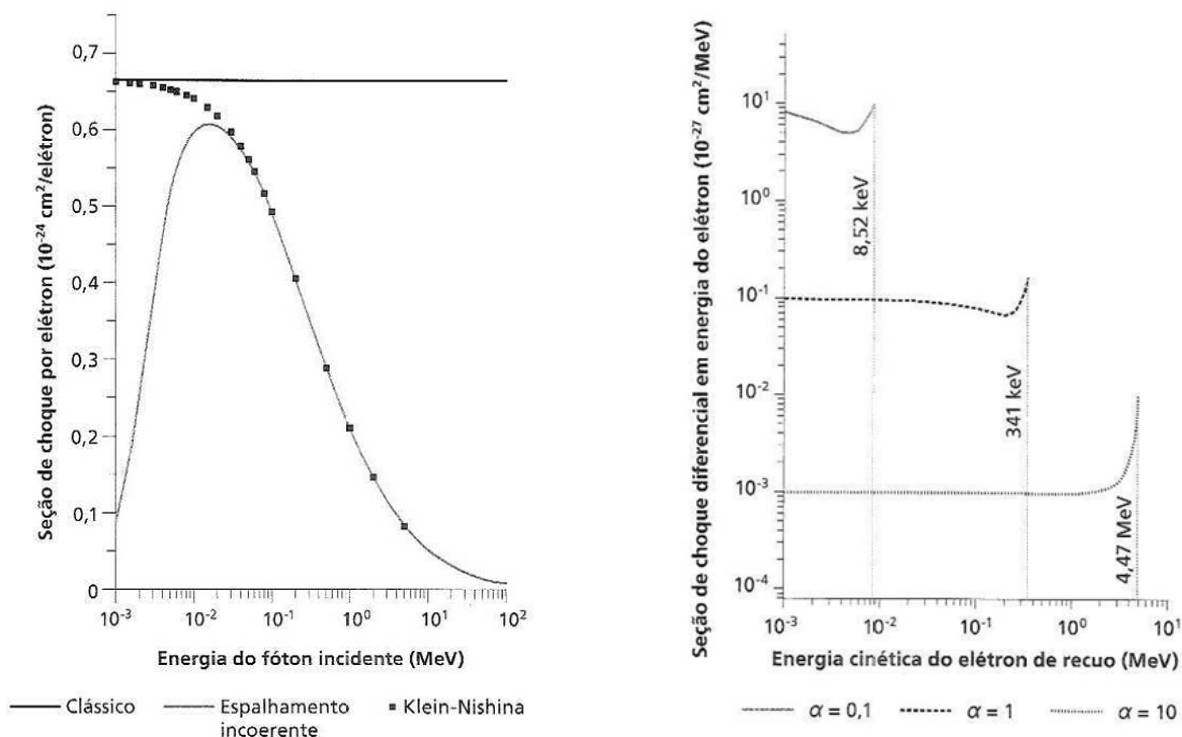


Fonte: Livro "Física das Radiações"[9].

A seção de choque do efeito Compton é analisada primeiramente em função do ângulo de espalhamento (seção de choque diferencial em ângulo), mas também há aquela associada à energia transferida (seção de choque em função da energia transferida). A primeira mostra a probabilidade de o fóton ser espalhado para uma direção deslocada de um ângulo θ em relação à direção do feixe incidente. Especificamente, representa a probabilidade de o fóton ser espalhado na região compreendida entre dois cones com ângulos de abertura θ e $\theta + d\theta$. Esse cálculo é feito para cada elétron; portanto, para obter a seção de choque do átomo (σ), basta multiplicar o resultado por Z .

É importante frisar que as expressões de Klein-Nishina, que consideram o elétron livre e em repouso, apresentam divergências em relação ao modelo corrigido, que leva em conta os elétrons ligados e com energia cinética. A Figura 2.12 mostra essa disparidade entre ambos os modelos:

Figura 2.12: Imagem à esquerda: Gráfico da seção de choque por elétron para espalhamento de um fóton em função de sua energia de acordo com os resultados obtidos por Thompson (Clássico), Klein e Nishina e, também, os resultados mais recentes e aceitos para o espalhamento incoerente. Imagem à direita: Gráfico da seção de choque diferencial em energia transferida por elétron segundo Klein-Nishina. As retas pontilhadas indicam as energias máximas dos elétrons após a interação.



Fonte: Livro "Física das Radiações"[9].

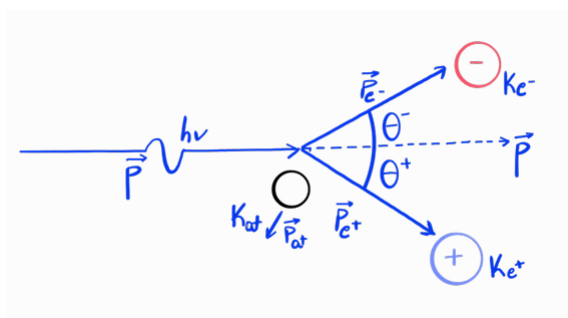
Percebe-se na Figura 2.12 que a diferença ocorre para fótons de baixa energia, região na qual o elétron ainda não pode ser considerado livre.

A seção de choque diferencial em energia transferida calcula a probabilidade de a energia transferida do fóton ao elétron estar entre K e $K + dK$. Dessa forma, obtém-se o espectro de

energia do efeito Compton.

A produção de par elétron-pósitron é fruto da interação de um fóton de energia mínima de 1,022 MeV (massa de repouso do par) com o campo coulombiano de um núcleo. Além disso, esse é o efeito predominante em altas energias, pois sua seção de choque cresce com o aumento da energia do fóton, como visto na Figura 2.14.

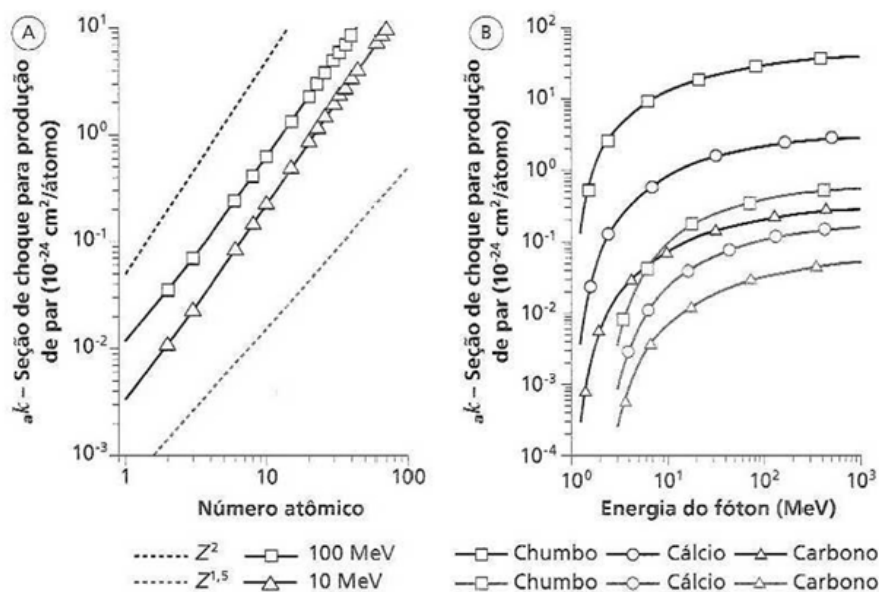
Figura 2.13: Esquema produção de par.



Fonte: Elaborado pelo autor.

O fóton tem sua energia inteiramente transformada em massa de repouso e energia cinética de um par partícula-antipartícula, sendo o par elétron-pósitron o mais comum na escala de energia da radioterapia.

Figura 2.14: Gráficos da seção de choque para a produção de par em função do número atômico para algumas energias de fóton incidente (A) e em função da energia do fóton para alguns elementos químicos (B). As curvas em cinza no gráfico (B) referem-se à produção de tripleto. Valores obtidos a partir da base de dados XCOM.

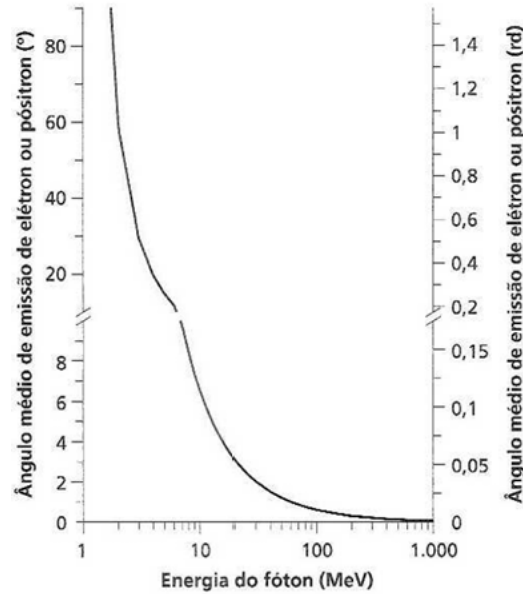


Fonte: Livro "Física das Radiações"[9].

Para a produção de par, a seção de choque também é complexa para ser descrita analiticamente e envolve artifícios matemáticos fora do escopo deste trabalho. No entanto, sabe-se

que a seção de choque da produção de par (κ) cresce aproximadamente com Z^2 (entre $Z^{1,5}$ e Z^2) e aumenta com a energia do fóton incidente. Sobre a distribuição angular do par, ela se aproxima da direção do fóton incidente à medida que a energia do fóton aumenta, como visto na Figura 2.15.

Figura 2.15: Gráfico do ângulo médio de emissão de elétron ou pósitron em graus (°) e em radianos (rd) em função da energia do fóton.



Fonte: Livro "Física das Radiações"[9].

2.1.3 ATENUAÇÃO DE FÓTONS

A atenuação de um feixe de radiação é a redução de sua intensidade à medida que atravessa e interage com um meio material, e estudá-la é fundamental para entender o comportamento do feixe em diferentes materiais e diferentes energias. O feixe monoenergético é aquele caracterizado por fótons que possuem a mesma energia que, portanto, possui um espectro de emissão discreto e, portanto, sua atenuação pode ser descrita em função da quantidade do feixe, ou seja, do número de fótons. A expressão a seguir descreve o número de fótons restantes (N) em função do número de fótons iniciais (N_0), do coeficiente de atenuação linear (μ) e da distância x percorrida no meio:

$$N = N_0 e^{-\mu x} \quad (2.12)$$

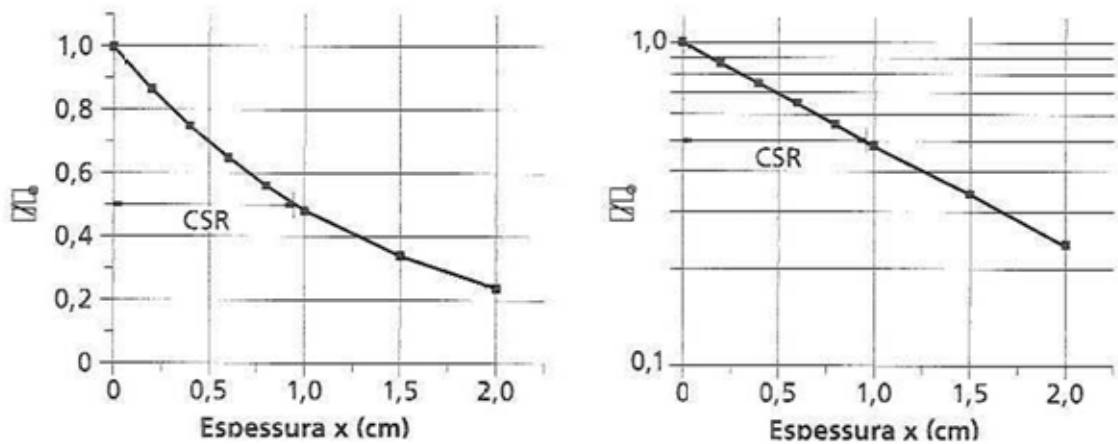
Uma relação equivalente pode ser feita para a intensidade do feixe:

$$I = I_0 e^{-\mu x} \quad (2.13)$$

em que I_0 e I são as intensidades iniciais e na profundidade x , respectivamente.

O conhecimento da atenuação do feixe ao longo da espessura de um material é essencial para a proteção radiológica, pois permite estimar a intensidade da radiação transmitida e dimensionar adequadamente as blindagens utilizadas em instalações e procedimentos que empregam radiação ionizante, incluindo aplicações médicas. A Figura 2.16 mostra a atenuação de um feixe monoenergético atravessando uma placa de chumbo.

Figura 2.16: Intensidade (N/N_0) de um feixe de raios γ de 1,25 MeV em função da espessura em cm de uma placa de chumbo.



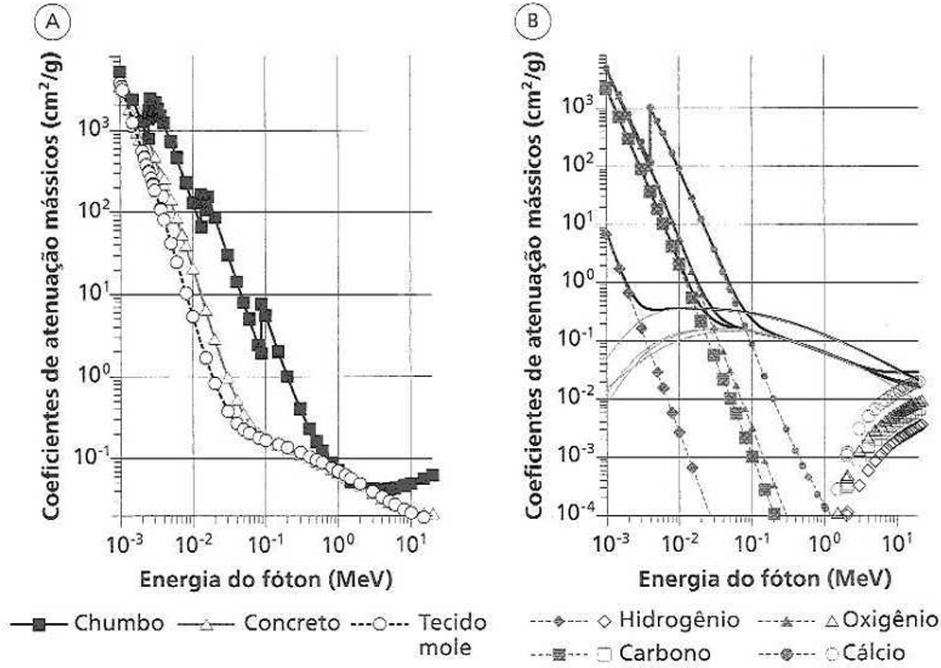
Fonte: Livro "Física das Radiações"[9].

Por outro lado, a atenuação de feixes polienergéticos está relacionada ao fato de o feixe ser composto por fótons de diferentes energias, os quais, conseqüentemente, possuem diferentes coeficientes de atenuação. Portanto, o cálculo da atenuação do feixe se torna mais complexo. Em geral, os fótons menos energéticos tendem a interagir mais com a matéria do que os mais energéticos. Esse fenômeno faz com que o feixe "endureça" à medida que atravessa o meio, o que resulta em um feixe cuja energia média cresce ao longo de sua trajetória, devido à maior proporção de fótons de alta energia remanescentes. Para a caracterização do espectro de feixes polienergéticos, frequentemente realizam-se simulações com o método Monte Carlo, pois a coleta de dados experimentais com a devida precisão é difícil de ser feita. Essa é uma forma de obter parâmetros fundamentais para determinar a qualidade do feixe, garantindo seu uso com máxima segurança.

Apesar das diferenças entre a atenuação de feixes monoenergéticos e polienergéticos, o coeficiente de atenuação linear (μ) permanece como uma das grandezas mais importantes na descrição da interação da radiação com a matéria. Esse coeficiente expressa a probabilidade de um fóton ser removido do feixe por unidade de comprimento percorrido no material, seja por absorção ou por espalhamento para fora da direção original de propagação. Ele é calculado a partir da soma dos coeficientes de atenuação por cada interação:

$$\mu = \mu_{coe} + \mu_{com} + \mu_{foto} + \mu_{par} \quad (2.14)$$

Figura 2.17: Gráficos do coeficiente de atenuação mássico com a energia do fóton. (A) coeficientes totais para chumbo, concreto (composto de O - 57,5%, Si - 30,5%, Ca - 4,3%, H - 2,2%, Al - 2%, Na - 1,5%, K - 1%, Fe - 0,64%, C - 0,25% e Mg - 0,13%) e tecido mole (O - 70,8%, C - 14,3%, H - 10,2%, N - 3,4%, P, S e K - 0,3%, Na e Cl - 0,2%); (B) coeficientes mássicos parciais para efeito fotoelétrico (símbolos cheios unidos por retas tracejadas), efeito Compton (linhas claras) e produção de par (símbolos vazios), e total (linha grossa) para H, C, O e Ca.



Fonte: Livro "Física das Radiações"[9].

em que a relação entre a seção de choque de valor σ e o seu respectivo coeficiente de atenuação linear (μ) se dá por:

$$\mu = n\sigma \quad (2.15)$$

em que $n = \frac{N_A \rho}{M}$ é a densidade volumétrica do átomo. Assim, é possível escrever o coeficiente de atenuação linear em função das seções de choque individuais:

$$\mu = (\sigma_{coe} + \sigma + \tau + \kappa) \frac{N_A \rho}{M} \quad (2.16)$$

onde N_A é o número de Avogadro, ρ é a densidade mássica [$\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$] e M é a massa molar [$\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$].

Também é utilizado o coeficiente de atenuação mássico $\left(\frac{\mu}{\rho}\right)$ [$\text{cm}^2 \cdot \text{g}^{-1}$], pois ele é normalizado pela densidade do meio e, portanto, sofre menos variação com mudanças no estado físico do material.

Embora esses coeficientes descrevam a probabilidade de interação dos fótons com a matéria, eles não indicam a quantidade de energia efetivamente transferida ao meio. Essa energia é aquela que foi cedida às partículas carregadas em forma de energia cinética, pela interação dos fótons. A energia média transferida ao meio (E_{tr}) pode ser calculada pela energia transferida em cada fenômeno, ponderada pela sua respectiva probabilidade de ocorrência. Aqui, a seção

de choque coerente (σ_{coe}) é desconsiderada, visto que nesse processo quase toda a energia do fóton é preservada. Dessa forma, tem-se:

$$E_{tr} = \left[\frac{\sigma}{\rho}(E_{tr\sigma}) + \frac{\tau}{\rho}(E_{tr\tau}) + \frac{\kappa}{\rho}(E_{tr\kappa}) \right] \frac{\rho}{\mu} \quad (2.17)$$

em que

$$E_{tr\sigma} = h(\nu - \nu') \quad (2.18)$$

$$E_{tr\tau} = h\nu - E_{lig} + \sum K_{Auger} \quad (2.19)$$

$$E_{tr\kappa} = h\nu - 2m_e c^2 \quad (2.20)$$

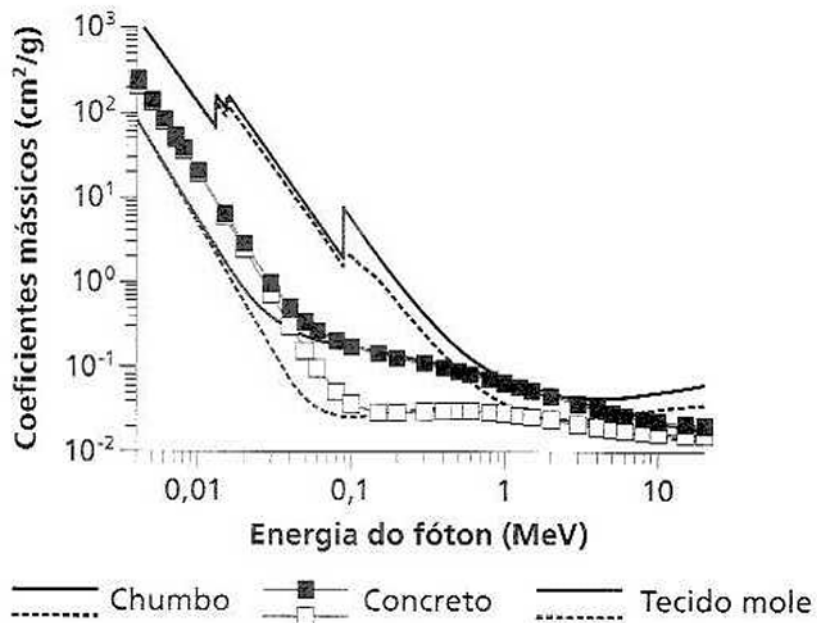
No entanto, a E_{tr} não é necessariamente igual à energia média absorvida (E_{ab}), pois nem toda a energia cinética das partículas será convertida em ionizações. Portanto, a relação entre ambas as grandezas é expressa por

$$E_{ab} = (1 - g)E_{tr} \quad (2.21)$$

Nessa equação, g é a fração da energia transferida pelos fótons aos elétrons a qual é irradiada, e não convertida em ionizações no meio. Nota-se que g e Y representam, essencialmente, o mesmo conceito. Contudo, enquanto o fator g analisa a fração de energia transferida ao meio pelo feixe de fótons que foi transformada em raios X de freamento, Y analisa a fração da energia cinética inicial dos elétrons que foi transformada em raios X de freamento. Portanto, estabelece-se que:

$$g = Y(E_0) \quad (2.22)$$

Figura 2.18: Gráfico do coeficiente de atenuação linear e de absorção de energia com $h\nu$. Linhas cheias e pontos cheios referem-se ao coeficiente mássico de atenuação e as linhas tracejadas e pontos vazios referem-se ao coeficiente de mássico de absorção de energia.



Fonte: Livro "Física das Radiações"[9].

2.1.4 LET

A energia transferida pelos fótons às partículas carregadas não é necessariamente absorvida no ponto em que ocorre a interação. À medida que essas partículas atravessam o meio, elas perdem energia por sucessivas interações com os átomos e moléculas do material. A quantidade de energia transferida ao meio por unidade de distância percorrida é chamada de transferência linear de energia (LET, *Linear Energy Transfer*) representa, que também pode ser interpretada como a densidade linear de ionizações. Matematicamente, a LET é definida como:

$$L_{\infty} = \frac{dE}{dx}. \quad (2.23)$$

em que (dE) representa a energia média transferida pela partícula carregada ao meio em um elemento infinitesimal de sua trajetória, e (dx) corresponde ao comprimento infinitesimal percorrido pela partícula. Sua medida no SI é [$J \cdot m^{-1}$], mas é comumente expressa em [$keV \cdot \mu m^{-1}$]. Para as partículas carregadas, considera-se que toda a energia perdida em interações de colisão é absorvida localmente pelo meio. Nesse caso, a LET coincide numericamente com o poder de freamento por colisão S_C . No caso do feixe de fótons, a LET representa a energia transferida ao meio pelos elétrons secundários que foram gerados nos processos de interação Compton, produção de par e efeito fotoelétrico.

É importante destacar que existem múltiplas formas de calcular a LET média em diferentes situações, assunto que é discutido com maior enfoque por Kalholm et al. [11].

Embora o LET forneça informações sobre a transferência de energia ao longo da trajetória das partículas carregadas, em dosimetria o principal interesse é quantificar a energia efetivamente absorvida pelo meio irradiado. Para isso, utiliza-se a grandeza dose absorvida (D), definida como a quantidade de energia depositada pela radiação ionizante por unidade de massa do meio:

$$D = \frac{d\epsilon}{dm} \quad (2.24)$$

Nessa definição, $d\epsilon$ é a energia absorvida pelo meio de massa dm , e D é expressa em $J \cdot kg^{-1}$ no Sistema Internacional de Unidades, o que equivale ao gray (Gy) [12]. Dessa forma, para o cálculo da dose absorvida pelo meio (D), é necessário obter, em cada ponto do espaço, a seguinte relação:

$$D = \frac{s_C}{\rho} \frac{N}{S} = \frac{L_{\infty} \phi}{\rho} = \frac{dE}{dm} \quad (2.25)$$

Nessa relação, N é o número de partículas que incidiram na área S do volume de massa dm e massa específica ρ . A razão $N/S = \phi$ representa a fluência de partículas, sendo esta a nomenclatura mais utilizada. Ademais, para o cálculo da dose absorvida média ($\bar{D}$), em um volume maior, utiliza-se a expressão simplificada:

$$\bar{D} = N \frac{\bar{E}_C}{m}. \quad (2.26)$$

em que $\bar{E}_C$ é a quantidade média de energia perdida por uma partícula em colisões ao longo do material de massa m .

2.2 RADIOBIOLOGIA

A radiobiologia estuda os efeitos da radiação ionizante nos sistemas biológicos e é de extrema importância para a radioterapia, sobretudo para a compreensão e exploração da janela terapêutica. A janela terapêutica é um conceito que se refere à diferenciação da resposta entre os tecidos saudáveis e os tumorais, sendo o princípio que viabiliza a aplicação clínica da radiação ionizante. Para a elaboração desta seção, foi adotado como base principal o livro "Radiobiologia: Da Bancada à Clínica", de Helena Regina Comodo Segreto [13].

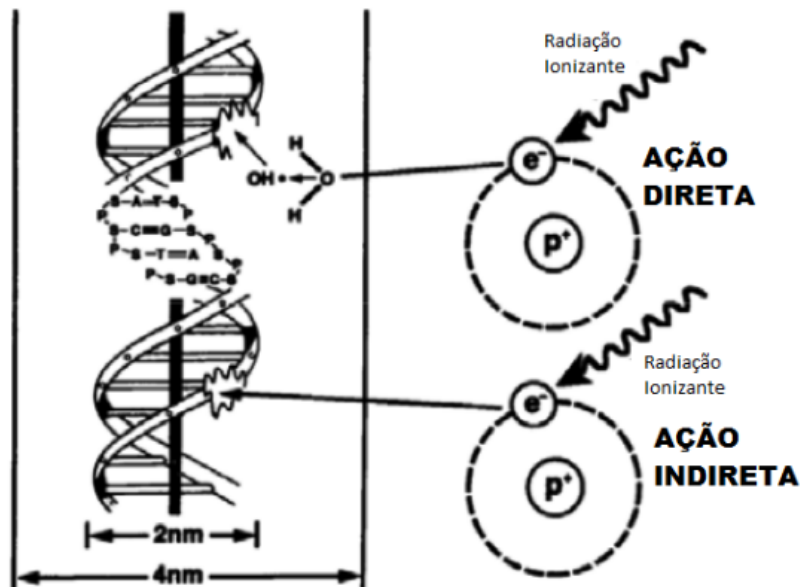
2.2.1 RADIAÇÃO E RESPOSTA BIOLÓGICA

A deposição de energia pela radiação ionizante desencadeia uma série de processos físicos, físico-químicos e químicos que podem resultar em danos às estruturas celulares. Existem dois tipos de efeitos da radiação estudados neste tópico: o efeito direto e o efeito indireto. O primeiro ocorre quando elétrons são ejetados após a absorção de energia pelo meio biológico e interagem diretamente com as moléculas biológicas, causando lesões. O segundo se manifesta quando o meio celular, composto predominantemente por água, absorve a radiação e gera radicais livres que, por sua vez, lesionam a molécula de DNA. Os radicais livres são átomos, moléculas ou íons que possuem um elétron desemparelhado e, portanto, são extremamente reativos. O efeito direto é responsável por aproximadamente 30% do dano biológico, enquanto o efeito indireto é responsável por aproximadamente 70%. Para feixes de partículas carregadas, a quantidade de danos diretos é ligeiramente superior àquela encontrada em feixes de fótons, devido ao seu maior LET.

Após a absorção da radiação, as moléculas de água sofrem radiólise, originando espécies altamente reativas, como os radicais hidroxila ($\bullet\text{OH}$), hidrogênio ($\text{H}\bullet$) e o elétron aquoso (e_{aq}^-). Essas espécies reagem com biomoléculas, especialmente o DNA, produzindo radicais orgânicos ($\text{R}\bullet$) e promovendo danos celulares. Na presença de oxigênio, esses radicais orgânicos reagem rapidamente para formar radicais peróxido ($\text{R}\bullet\text{O}_2$) e outros produtos oxidados mais estáveis. Esse processo, conhecido como fixação pelo oxigênio, torna os danos ao DNA mais permanentes e reduz a probabilidade de reparo celular. Dessa forma, tecidos bem oxigenados apresentam maior radiosensibilidade do que tecidos hipóxicos. Em síntese, os radicais livres causam danos ao DNA por estresse oxidativo, enquanto o oxigênio fixa esses danos, impedindo qualquer reparo, processo conhecido como fixação pelo oxigênio. Para quantificar a influência dos níveis de oxigenação sobre os danos, utiliza-se o *Oxygen Enhancement Ratio* (OER), definido como

a razão entre as doses entregues ao tecido hipóxico e normóxico necessárias para produzir a mesma reação biológica. O OER diminui com o aumento do LET.

Figura 2.19: Ilustração dos efeitos direto e indireto da radiação na célula.



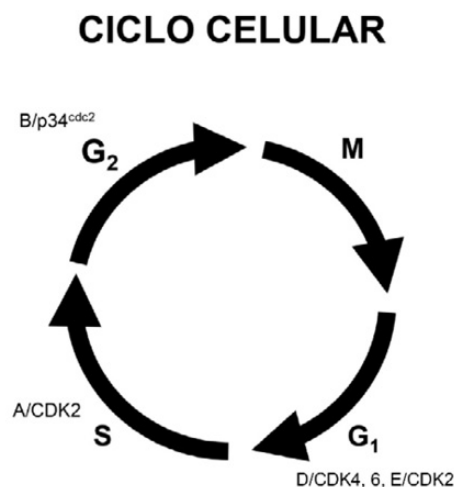
Fonte: Liberal [14].

Dentro das células, os principais alvos dos efeitos direto e indireto são o ácido desoxirribonucleico (DNA) e a membrana plasmática. O dano ao DNA é o principal mecanismo de controle tumoral, pois, ao lesionar essa molécula, sua estrutura é alterada e, caso não seja reparada ou seja reparada incorretamente, a célula perde a sua capacidade replicativa, culminando na morte celular. Os principais tipos de dano causado ao DNA estão relacionados à quebra das fitas, que podem ser simples (*Single-Strand Break*) ou duplas (*Double-Strand Break*), sendo estas últimas as lesões de maior relevância biológica devido à maior complexidade de seu reparo. A proporção entre elas é considerada a mesma para as células de tecido mole, que é de 20 a 40 quebras duplas a cada 1000 quebras simples por gray de radiação. Além disso, podem ocorrer as lesões em "cachos" (*cluster lesions*), que são várias lesões concentradas em um pequeno segmento da molécula de DNA e constituem danos complexos de serem reparados.

As quebras e os erros de reparo do DNA podem também se manifestar em nível cromossômico, dando origem a aberrações cromossômicas estáveis e instáveis. Após a irradiação, percebe-se um aumento considerável na formação das aberrações instáveis, como os cromossomos dicêntricos e em anel, que aumentam significativamente a probabilidade de morte celular. A membrana celular, quando é irradiada, apresenta rigidez em algumas áreas e enfraquecimento em outras, o que prejudica severamente sua integridade funcional.

A importância do dano biológico está atrelada à capacidade de reparo das lesões, de forma que ela é maior quanto mais complexas forem as lesões, e o resultado depende da dose irradiada e do tipo celular. Nesse sentido, as fases do ciclo celular, que são retardadas após a

Figura 2.20: Esquema do ciclo celular. M: mitose; S: síntese; G1 e G2: *Gaps* 1 e 2.



Fonte: Livro "Radiobiologia: Da Bancada à Clínica"[13].

irradiação, influenciam a radiosensibilidade das células. Por um lado, a célula é mais sensível nas fases G₂/M, visto que há maior compactação do DNA, o que implica maior densidade de *clustered lesions* e dificulta o acesso das enzimas reparadoras. Por outro lado, ela é menos sensível na fase S, o que é explicado pela duplicidade de conteúdo e estrutura descompactada da cromatina, e na fase de transição G₁/S, devido ao pico de fosforilação³ da enzima DNA-PK, que é fundamental para o reparo de quebras de fitas.

Embora a radiosensibilidade seja uma propriedade das células individuais, os efeitos da radiação em um organismo dependem também das características do tecido irradiado. Em razão das diferenças na atividade proliferativa e na capacidade de renovação celular, os tecidos apresentam respostas biológicas distintas à irradiação, sendo classificados de duas formas quanto ao seu tempo de resposta biológica: tecidos de resposta lenta e tecidos de resposta rápida. Os tecidos de resposta lenta são caracterizados por apresentarem efeitos biológicos muito tempo após a irradiação devido à sua baixa atividade mitótica. Exemplos desses tecidos são o ósseo, muscular, nervoso e conjuntivo. Devido à essa baixa atividade mitótica, eles são menos radiosensíveis e, conseqüentemente, possuem uma capacidade de reparo superior à dos tecidos de resposta rápida. Contudo, se o dano exceder a capacidade de regeneração, essas células morrem e não são prontamente substituídas. Sua resposta está associada à perda da atividade metabólica, à redução dos níveis de oxigenação e a processos inflamatórios. Por outro lado, os tecidos de resposta rápida são aqueles com maior atividade mitótica e, portanto, apresentam capacidade de reparo inferior. No entanto, mesmo que ocorra a morte dessas células, elas são rapidamente substituídas. Exemplos desses tecidos são o epitelial e a maioria dos tumores.

Diferentes órgãos e diferentes tecidos, de resposta rápida ou lenta, possuem um detalhe

³A fosforilação de proteínas acontece quando enzimas quinases adicionam um grupo fosfato a outras proteínas para alterar suas estruturas e ativar ou inativar suas funções biológicas. A ação inversa, a desfosforilação, é feita pelas fosfatases, que retornam a proteína à sua estrutura original ao retirar o grupo fosfato.

importante que pode influenciar o seu reparo. Isto é a organização de suas Subunidades Funcionais (SUFs), que são as estruturas mínimas capazes de manter a função do tecido, em série ou em paralelo. Quando as SUFs estão organizadas em série, como no sistema nervoso, elas são completamente dependentes umas das outras e, portanto, caso alguma seja danificada e perca sua função, o tecido por completo pode ser impactado. Para o seu reparo, células não irradiadas migram para fechar aquela lacuna. Quando as SUFs estão organizadas em paralelo, como nos rins, elas são completamente independentes umas das outras, isto é, quando uma é irradiada e perde sua função, apenas as SUFs irradiadas são afetadas, mas não necessariamente o tecido por completo. O seu reparo depende das células sobreviventes de cada SUF, que se proliferam até recobrar sua função. Dessa forma, entende-se que a irradiação de pequenos volumes de tecidos com SUFs em paralelo não é tão prejudicial quanto a irradiação de pequenos volumes de tecidos com SUFs em série.

2.2.2 5 Rs DA RADIOTERAPIA

Uma das principais estratégias para aumentar a eficácia da radioterapia e reduzir a toxicidade nos tecidos normais é o fracionamento da dose, cujos benefícios foram observados no início do século XX pelo médico Henri Coutard, é fundamentado nos 5 Rs da radioterapia: redistribuição, reparo da lesão subletal (RLSL), repopulação, reoxigenação e radiosensibilidade.

A redistribuição refere-se às alterações na distribuição das células ao longo do ciclo celular entre as frações de tratamento. Quando um volume é irradiado, as células que estão nas fases mais sensíveis (G2/M) morrem e as que estão na fase menos sensível (S) sobrevivem e têm a progressão de seus ciclos interrompida. Posteriormente, em um intervalo de tempo de aproximadamente 20 horas, aquelas que sobreviveram avançam no ciclo e, assim, haverá uma maior proporção de células nas fases mais sensíveis para a próxima entrega de dose. Os tumores possuem uma atividade mitótica maior do que a das células de onde se originaram. Dessa forma, essa redistribuição das células que estavam na fase S para as fases G2/M ocorre mais rapidamente para os tumores e, assim, obtém-se uma sensibilização maior das células malignas em relação às saudáveis.

O reparo da lesão subletal baseia-se na maior capacidade dos tecidos normais de reparar os danos induzidos pela radiação durante o intervalo entre as frações de tratamento. Em contraste, o tumor, além de possuir alta atividade mitótica, o que confere à sua célula menor capacidade de reparo de lesões, é muitas vezes ineficaz na ativação dos *checkpoints* para que os reparos possam acontecer. Dessa forma, os tecidos saudáveis, especialmente os de resposta lenta, possuem uma capacidade superior de reparo da lesão subletal entre frações, enquanto as células tumorais tendem a acumular danos, aumentando o efeito diferencial da radioterapia entre o tecido normal e o tumoral.

A repopulação refere-se à proliferação das células durante e após o tratamento. Os tecidos com alta taxa mitótica, como o normal de resposta rápida, beneficiam-se de um tempo total de tratamento prolongado, pois isso lhes permite repovoar o tecido sadio e mitigar os

efeitos determinísticos. Contudo, esse prolongamento pode ser prejudicial, visto que favorece a repopulação do tumor também. Já os tecidos de resposta lenta são pouco preservados com um longo período de tratamento, possivelmente aumentando os efeitos do tratamento a longo prazo. Portanto, a repopulação é um importante fator na definição do tempo do tratamento a fim de minimizar os efeitos colaterais ao paciente e as chances de perda do controle sobre o crescimento do tumor.

Sabe-se que a proporção de células hipóxicas em um tumor é aproximadamente a mesma antes e depois da irradiação. Portanto, à medida que as células tumorais oxigenadas morrem, algumas das células hipóxicas devem receber oxigênio. Esse é o processo de reoxigenação do tumor, que é extremamente importante para aumentar a eficiência do tratamento, visto que ele proporciona uma sensibilização daquelas células que antes eram hipóxicas.

A radiosensibilidade se refere ao quão vulnerável uma célula é à radiação ionizante. Ela é um fator intrínseco de certos tecidos e possui forte correlação com sua capacidade reprodutiva e com os níveis de oxigenação daquele ambiente, que, quando alterados, podem proteger ou vulnerabilizar aquela célula.

Ademais, o meio acadêmico propõe a adição de mais dois Rs: volume irradiado e resposta imune. Isso se deve ao fato de que o volume de tecido saudável irradiado, e não apenas a dose, possui grande influência sobre a toxicidade do tratamento e de que a radiação causa uma reação inflamatória que ativa o sistema imune local e à distância.

2.3 MÁQUINAS DA RADIOTERAPIA

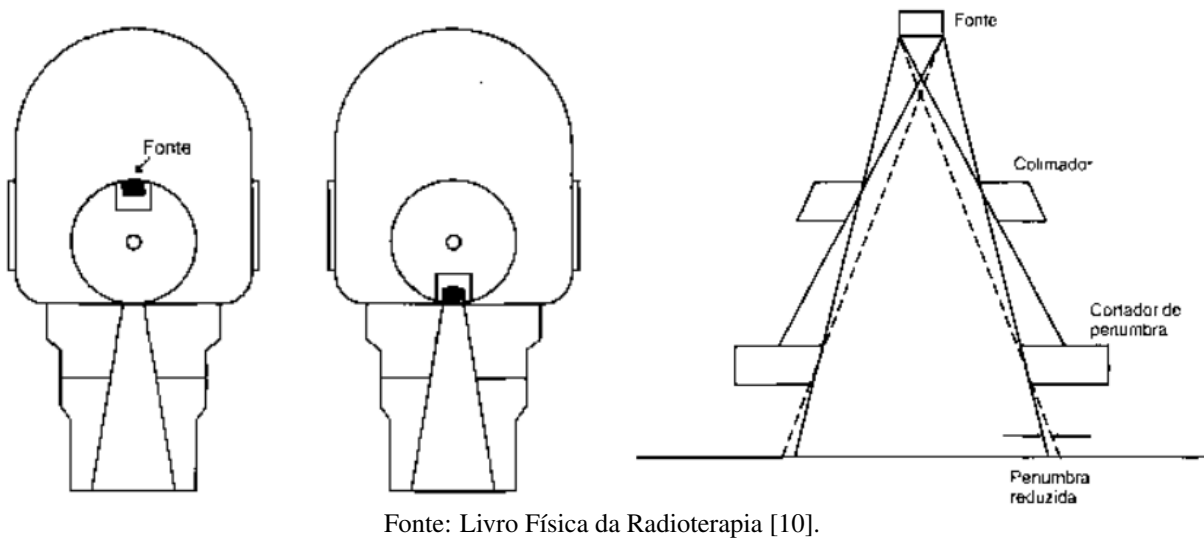
2.3.1 TELECOBALTOTERAPIA

A telecobaltoterapia é uma modalidade da radioterapia com fótons de raios γ de uma fonte de cobalto. A máquina dessa modalidade é a mais simples, compacta e acessível das três que serão discutidas. Até 1951, usava-se o rádio-226, mas suas máquinas eram caras e a eficiência do material como fonte para o tratamento era um pouco questionável. Então, com o artifício de reatores nucleares, tornou-se possível a produção de dois isótopos de alta atividade para tratamentos médicos: célio-137 e cobalto-60. No entanto, embora o célio-137 possua uma meia-vida longa (30 anos), o que lhe confere maior durabilidade, esse isótopo apresenta uma penumbra grande, um espectro de energia e um rendimento inferiores aos do cobalto-60. Isso fez com que a telecobaltoterapia fosse mais utilizada.

O espectro do feixe emitido pela fonte é discreto, visto que decorre da radioatividade do material e, logo, não é possível manipular diretamente a sua intensidade, nem é possível "desligá-lo". O cobalto-60 emite em cascata ⁴ raios γ de 1,17 MeV e 1,33 MeV. O funcionamento de sua máquina é baseado, principalmente, no mecanismo de exposição / bloqueio do feixe e no sistema de controle da penumbra física, que é a região entre as curvas de isodose de

⁴A emissão em cascata acontece quando um núcleo se desexcita, emitindo dois ou mais fótons de raios γ sequencialmente.

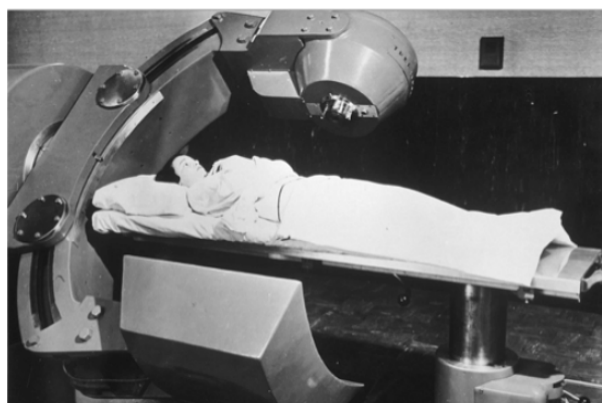
Figura 2.21: Imagem à esquerda: Ilustração do mecanismo de exposição da fonte de cobalto-60. Imagem à direita: Ilustração dos colimadores.



20% a 80% e que pode aumentar o volume de tecido saudável irradiado.

O mecanismo de bloqueio antigo do feixe é construído em aço inoxidável, possui formato cilíndrico com raio entre 1 e 2 cm e consiste em um sistema de rotação, em que o material radioativo está na extremidade da circunferência, isolado por uma camada de proteção, geralmente feita de chumbo e urânio, como visto na Figura 2.21. Os mais recentes possuem um sistema de gaveta, em vez de rotação. O sistema de controle da penumbra consiste no uso de colimadores para impedir que a região de penumbra que atinge o paciente seja maior que 1 cm. Em alguns casos, pode ser adicionada mais uma camada, chamada de cortador de penumbra, como visto na Figura 2.21.

Figura 2.22: Bomba de cobalto.



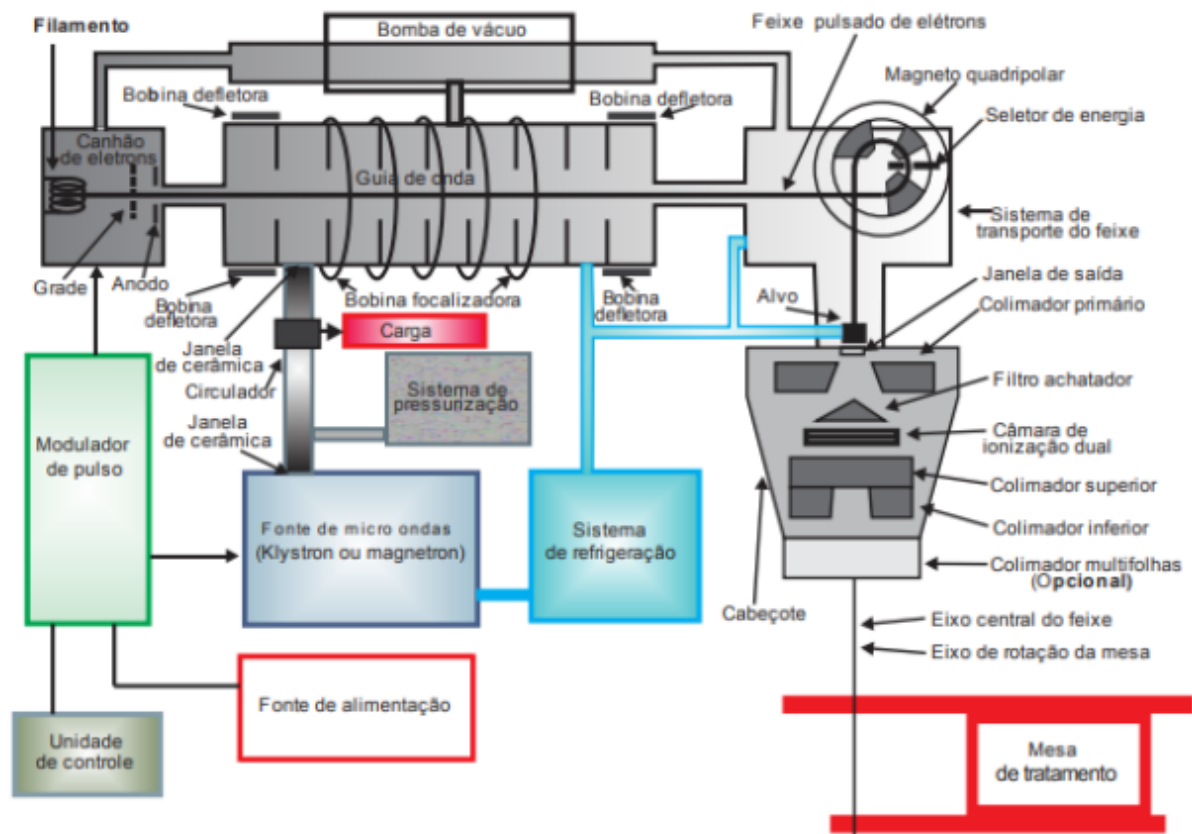
Fonte: Radioterapia Mineira [15].

2.3.2 LINAC

Os aceleradores lineares (LINACs) são equipamentos que aceleram elétrons por uma diferença de potencial equivalente de megavolts (MeV de energia cinética), possuem uma complexidade tecnológica superior às máquinas de cobalto e, conseqüentemente, não são tão compactos nem tão acessíveis. Os aceleradores lineares possuem um sistema que consiste na aceleração de um feixe de elétrons por ondas de radiofrequência (RF), o qual é guiado até um alvo de conversão para a produção de raios X terapêuticos. Para o tratamento com elétrons, o alvo de conversão possui um mecanismo retrátil. Existem LINACs de diferentes faixas de energias e elas são delimitadas principalmente pela frequência do magnetron (energias até 10 MeV) ou do klystron (energias acima de 10 MeV), que são válvulas termiônicas que geram ou amplificam ondas de rádio e micro-ondas, da máquina.

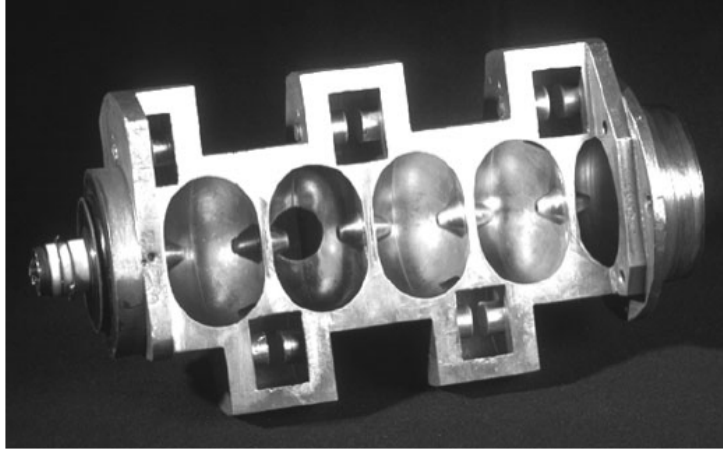
O acelerador linear é um tubo com vários discos metálicos de espaçamento inicial crescente e final constante. As ondas de RF são ondas eletromagnéticas, que consistem em campos elétricos e magnéticos oscilando em frequências da ordem de GHz e, portanto, ao atravessarem o tubo com os discos, induzem campos elétricos oscilantes e cargas na superfície das cavidades. O detalhe mais interessante é que, por serem campos oscilantes, as ondas de RF alteram o sentido desses campos periodicamente, gerando um sistema de corrente alternada (CA).

Figura 2.23: Esquema de um LINAC.



Fonte: Livro "Radiation Oncology Physics: A Handbook for Teachers and Students"[16].

Figura 2.24: Guia de ondas de aceleração de onda estacionária para um LINAC de 6 MV. As cavidades de aceleração estão ao longo do eixo central e as cavidades de acoplamento estão deslocadas do eixo central. O canhão de elétrons está à extrema esquerda e o alvo de conversão à extrema direita.



Fonte: Livro "*Radiation Oncology Physics: A Handbook for Teachers and Students*"[16].

Figura 2.25: Foto do LINAC *TrueBeam* da Varian.



Fonte: *Radiology Oncology Systems* [7].

Dessa forma, as ondas de RF são emitidas em pulsos de maneira a sincronizar a passagem do feixe de elétrons pelos buracos dos discos com a mudança da polaridade dos discos, de modo que o feixe é sempre atraído pelo disco da frente (positivo) e repelido pelo disco de trás (negativo). Além disso, os discos metálicos servem para frear as ondas de RF para que a velocidade delas acompanhe a velocidade do feixe. Perceba que o espaçamento dos discos deve ser crescente por dois motivos: (1) a frequência das ondas de RF não muda, mas a velocidade do feixe aumenta e, por isso, o feixe deve percorrer uma distância maior do que no segmento anterior para que a mudança da polaridade seja mantida em sincronia com a passagem do feixe pelos discos e não haja perda de eficiência; (2) os discos são um mecanismo de controle da velocidade da onda (λf), permitindo que ela acompanhe o aumento na velocidade do feixe de elétrons e que este possa “surfear” na onda eficientemente.

Posteriormente, o feixe de elétrons é direcionado à “cabeça” da máquina e sofre uma deflexão de aproximadamente 270° para interagir com o alvo de conversão de forma perpendicular ao eixo de rotação da máquina, para que o feixe de raios X produzido seja de transmissão (deflexão angular quase nula). Em seguida, o feixe é filtrado por um cone metálico e pelos colimadores móveis, geralmente de tungstênio e posteriormente deixam o equipamento para a irradiação desejada.

2.4 RADIOTERAPIA FLASH

2.4.1 EFEITO FLASH

Além da evolução dos equipamentos utilizados em radioterapia, novas estratégias de entrega da dose tem sido exploradas com o objetivo de ampliar a janela terapêutica. Neste contexto, destaca-se a radioterapia FLASH uma técnica de radioterapia com taxas de dose ultra-altas (≥ 40 Gy/s). Estudos experimentais indicam um efeito protetivo ao tecido saudável, mas com toxicidade ao tumor semelhante à radioterapia convencional. O nome dado à essa diferenciação da resposta do tecido normal em relação ao tecido tumoral é efeito FLASH.

Em 1959, D.L. Dewey e J.W. Boag publicaram o artigo "*Modification of the Oxygen Effect when Bacteria are given Large Pulses of Radiation*" (Modificação do Efeito do Oxigênio quando Bactérias recebem Grandes Pulsos de Radiação) [17], em que identificaram a ocorrência do efeito FLASH pela primeira vez. Nesse estudo, eles tinham como objetivo analisar a radiosensibilidade da bactéria *Serratia marcescens* em dois ambientes distintos.

Primeiro, eles irradiaram a bactéria com uma taxa de dose convencional (1000 rads/min = 10 Gy/min) em uma atmosfera de 100% de nitrogênio e, em seguida, em uma atmosfera de oxigênio-nitrogênio contendo 1% de oxigênio. Observou-se, então, que a bactéria era mais radiosensível na atmosfera contendo oxigênio. Contudo, quando conduziram o mesmo experimento com uma taxa de dose ultra-alta ($10\text{-}20$ kilorads/ $2\mu\text{s}$ = $50\text{-}100$ Gy/ μs = $50\text{-}100 \times 10^6$ Gy/s), a bactéria apresentou menor radiosensibilidade na mesma atmosfera de oxigênio-nitrogênio. Assim, o estudo de Dewey e Boag demonstrou que a irradiação em taxas de dose ultra-altas pode causar um efeito protetor na bactéria se comparada às taxas de dose convencionais [18, 17].

Foi apenas em 2014 que o efeito FLASH se tornou o centro das atenções com potencial clínico. Neste ano, o Dr. Vincent Favaudon tratou um rato com câncer de pulmão utilizando radioterapia FLASH (≥ 40 Gy/s) com feixe de elétrons e observou, em relação à radioterapia convencional, um controle tumoral similar e uma redução significativa nos efeitos de curto e longo prazo nos tecidos saudáveis [8].

Desde a publicação do trabalho do Dr. Vincent Favaudon, diversos cientistas e pesquisadores começaram a explorar e conduzir mais estudos sobre a radioterapia FLASH a fim de entender seu mecanismo biológico, parâmetros e desafios envolvidos em sua transição clínica. Esses experimentos foram conduzidos principalmente em roedores até que em 2019, Bourhis J. et al. [19] trataram com radioterapia FLASH, pela primeira vez, um paciente com linfoma

cutâneo de células T. A taxa de dose entregue foi de 166,7 Gy/s por um feixe de elétrons e o paciente obteve resposta completa do tumor e apresentou epitelite e edema de primeiro grau na pele, que são efeitos colaterais mais razoáveis do que os esperados em um tratamento com radioterapia convencional.

Até então, o efeito FLASH parecia ser o ingrediente principal da panaceia da radioterapia no futuro, tendo em vista todos os resultados positivos com roedores e o tratamento bem-sucedido do primeiro paciente. Contudo, à medida que mamíferos mais complexos como caninos e felinos foram tratados, inconsistências surgiram. Isso se deve ao fato de que os roedores são modelos idealizados devido à maior homogeneidade dos sistemas. Assim, os resultados obtidos com esses animais negligenciam a maior complexidade, heterogeneidade e volume irradiado dos seres humanos. O primeiro exemplo de inconsistência e definição de limites vem de modelos caninos de câncer oral envolvendo o osso cortical que apresentaram, após tratamento com radioterapia FLASH, osteonecrose severa. Esse achado imediatamente levanta algumas questões acerca da universalidade do efeito FLASH e de sua dependência de certos parâmetros/fatores [20].

2.4.2 MECANISMO DE AÇÃO

A hipótese mais defendida acerca do mecanismo causador da diferenciação dos efeitos no tecido normal em relação ao tumor tem como fundamentos o consumo de oxigênio (hipóxia transitória) e a coleta de radicais [20, 18].

Com a irradiação de um feixe de taxa de dose ultra-alta (≥ 40 Gy/s), ocorrerá a radiólise da água em escalas muito maiores do que em taxas de dose convencionais na área irradiada. O tecido normal possui maiores concentrações de oxigênio molecular (O_2) devido à sua alta vascularização. Portanto, quando a radiólise da água acontecer em grandes quantidades, as moléculas de O_2 se ligarão aos radicais livres $H^\bullet$ e $^\bullet OH$ produzidos pela radiólise e, assim, evitarão danos às fitas de DNA de forma indireta (que representam 70% dos casos). Dessa forma, com o consumo repentino de O_2 , não há fixação de dano pelo oxigênio, o que reduz o efeito da irradiação no tecido normal e o preserva.

Além disso, o tecido normal apresenta uma baixa carga oxidante e uma grande reserva da enzima catalase, que é o principal agente antioxidante das células, responsável por converter substâncias altamente oxidantes, como o peróxido de hidrogênio (presente em altas concentrações após a irradiação), em água e oxigênio. Por outro lado, o tecido tumoral apresenta maior carga oxidante, uma reserva de enzima catalase reduzida e geralmente é pouco vascularizado (hipóxico). Portanto, ele não é capaz de "aniquilar" os radicais livres por meio do O_2 nem evitar os danos causados pelo estresse oxidativo dos produtos do peróxido de hidrogênio com a mesma eficácia do tecido saudável.

Essa hipótese faz muito sentido quando se olha para animais de pequeno porte como os roedores. No entanto, nos mamíferos de maior porte, nem todos os tecidos normais são uniformemente vascularizados e/ou altamente vascularizados e nem todos os tumores são ma-

oritariamente hipóxicos. Essa heterogeneidade da vascularização e as características únicas de certos tecidos podem influenciar a viabilidade do tratamento com taxa de dose ultra-alta e até mesmo a ocorrência do efeito FLASH. De forma geral, as inconsistências observadas em tratamentos de mamíferos mais complexos e de maior porte indicam que o efeito FLASH deve ser dependente dos seguintes fatores: volume irradiado, tipo de tecido irradiado e dose [20].

Outro detalhe importante sobre a hipótese acima é que ela ainda não é capaz de explicar as respostas imunomoduladoras observadas, por exemplo, no estudo a seguir.

S. Shukla et al. no trabalho *"Ultra-high dose-rate proton FLASH improves tumor control"* (Taxas de dose ultra-altas de FLASH com prótons melhoram controle tumoral) [21], investigaram e compararam os resultados de tratamentos com FLASH (FLASH-RT) e tratamentos convencionais (CONV-RT), ambos com feixe de prótons. A equipe utilizou o modelo ortotópico de Carcinoma Pulmonar de Lewis ⁵ e o implantou em roedores, que foram irradiados 15 dias após a implantação. Posteriormente, as amostras do tecido foram coletadas no quinto e no oitavo dia após a exposição. Um feixe de transmissão ⁶ monoenergético de 244 MeV foi utilizado para entregar 1 Gy/s de taxa de dose convencional. Para entregar 60 Gy/s, foi utilizado um feixe de transmissão monoenergético de 250 MeV.

É importante destacar que a preocupação principal desse estudo é analisar a viabilidade da FLASH-RT com prótons em tratar câncer de pulmão de células não pequenas (CPCNP), pois, mesmo com o aumento da precisão e os avanços de novas tecnologias como a IMRT (Radioterapia de Intensidade Modulada), os feixes de elétrons e fótons irradiam um volume considerável de tecido pulmonar, que é muito radiossensível.

Como resultado imunomodulador, o estudo apontou uma maior infiltração de células T citotóxicas CD8+ nas células tumorais e uma menor quantidade de células imunossupressoras Treg após o tratamento com FLASH-RT em relação ao grupo de controle e à CONV-RT. O volume dos tumores após FLASH-RT e CONV-RT diminuiu em escalas semelhantes. No entanto, em ambos os grupos de tecidos coletados 5 e 8 dias após a irradiação, foram identificadas menos células tumorais nos volumes irradiados com FLASH-RT em relação aos irradiados com CONV-RT. Além disso, ao realizarem a técnica de coloração para identificarem os focos nucleares dos marcadores γ H2AX, que são indicadores de danos ao DNA, observaram uma maior porcentagem de focos de γ H2AX nos tumores irradiados por FLASH-RT em relação aos irradiados por CONV-RT. Isso implica que houve mais danos ao DNA das células tumorais irradiadas por FLASH-RT.

Ademais, o estudo investigou a quantidade de macrófagos pró-tumorais tipo M2, que possuem marcadores de superfície celular CD163, e de anti-tumorais tipo M1, que expressam síntese de óxido nítrico induzida (iNOS). Em seguida, o estudo analisou a relação entre a quan-

⁵O Carcinoma Pulmonar de Lewis é um modelo de câncer de pulmão de crescimento rápido, muito utilizado em experimentos em laboratórios.

⁶O feixe de transmissão atravessa o paciente e a dose depositada é a da região do platô do gráfico, enquanto o Bragg Peak não é utilizado. Isso serve para driblar o problema de que não é possível, ainda, realizar o Spread-Out Bragg Peak com FLASH-RT.

tidade de macrófagos à quantidade de células T CD3+ associadas aos tumores. Foi observado que em ambas as modalidades (FLASH e CONV) houve um aumento de macrófagos tipo M1 e uma redução de macrófagos tipo M2 proporcionais ao aumento de células T CD3+ infiltradas, o que significa que o aumento de macrófagos M1 facilitou a infiltração das células defensoras nos tumores.

Por fim, o estudo analisou a ativação da via PD-1/PD-L1 ⁷ nos tumores, que é um mecanismo para inibir a atividade citotóxica das células T, e observou uma redução da ativação dessas vias nas amostras de FLASH e CONV. No entanto, a redução foi muito maior nos tumores irradiados por FLASH, a indicar que ela foi mais eficiente em reduzir a atividade imunossupressora das células de câncer.

2.5 TECNOLOGIAS E PROJETOS PARA REALIZAÇÃO DE TRATAMENTOS FLASH

Sabe-se que o efeito FLASH pode ser reproduzido com feixes de elétrons, prótons e raios X, que são os mais utilizados na radioterapia. No entanto, cada um desses feixes possui suas vantagens e desvantagens devido à sua interação com a matéria e à forma como cada um é produzido para o contexto clínico [20].

Os elétrons, por depositarem a maior parte de sua energia na superfície ao interagirem com a matéria, são ideais para o tratamento de tumores superficiais, como foi o caso do primeiro paciente, que tinha um câncer cutâneo de células T (tipo de câncer de pele) e foi tratado com um feixe de elétrons. No entanto, há projetos e pesquisas que visam o uso de VHEE (*Very High Energy Electrons*) para o tratamento de tumores profundos. Em termos de viabilidade tecnológica, a produção de feixes de elétrons de alta energia para fins radioterápicos é possível por meio de modificações em Aceleradores Lineares (LINACs), que são mais comumente utilizados em hospitais, apesar de seu acesso a essa tecnologia ainda ser limitado.

Os prótons, por possuírem uma grande capacidade de penetração e depositarem a maior parte de sua energia no pico de Bragg, seriam a opção ideal para o tratamento de tumores profundos. Para a produção de feixes de prótons na faixa de energia do efeito FLASH, são necessárias modificações nos ciclotrons e síncrotrons que aceleram os prótons. No entanto, a viabilidade financeira dessas máquinas é extremamente baixa, visto que são exorbitantemente caras e ocupam um espaço proporcional ao seu preço. Portanto, seu acesso seria restrito aos poucos países que já possuem essas máquinas de radioterapia com prótons.

Os raios X, por possuírem uma maior penetração do que os elétrons, são interessantes para o tratamento de tumores mais profundos. Pelo lado financeiro, o tratamento de tumores profundos com radioterapia FLASH com raios X seria muito mais atrativo e acessível do que com prótons. Entretanto, sua viabilidade tecnológica é muito baixa, pois os LINACs devem

⁷As células normais possuem uma proteína em sua superfície (PD-L1) que funciona como uma "chave" que, ao ser ligada à sua "fechadura" (PD-1), situada nas células T, transmite à célula de defesa um sinal inibitório. O problema é que as células cancerígenas utilizam esse mecanismo para se "esconder" do sistema imunológico.

gerar feixes de elétrons com fluência ao menos 1000 vezes maior do que a dos feixes em taxas de dose convencionais, visto que menos de 5% da energia do feixe de elétrons se transforma em raios X de freamento, e o alvo de conversão deve suportar esse aumento drástico de energia. Dessa forma, os prótons se sobressaem aos raios X quanto à viabilidade tecnológica e os elétrons também se mostram promissores, até mesmo para tumores profundos.

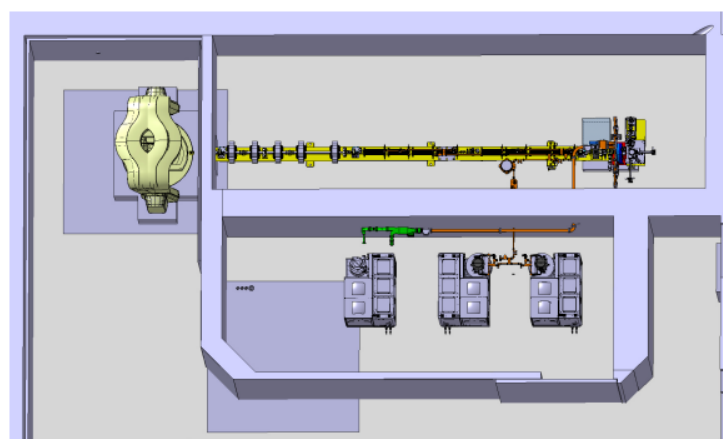
Tendo em vista que ainda existem limitações tecnológicas para a condução de estudos mais avançados e até mesmo para o uso clínico, apresentam-se a seguir alguns dos projetos que estão em desenvolvimento e visam a uma maior segurança e precisão nos novos tipos de tratamento, em especial, na FLASH-RT.

2.5.1 DEFT

A *Deep Electron FLASH Therapy* (DEFT) [22] é um projeto de uma máquina de radioterapia capaz de produzir elétrons de energia muito alta (VHEE) (100-250 MeV) para o tratamento de tumores profundos com taxas de dose ultra-altas (UHDR). O projeto surge como uma solução para o problema da produção de VHEE em Aceleradores Lineares (LINACs) convencionais (6-25 MeV). Baseado na tecnologia de radiofrequência (RF) de banda X (8-12 GHz) utilizada pelo CERN (Organização Europeia para Pesquisa Nuclear) em seus colisores lineares, o projeto possibilitará a criação de uma máquina mais compacta capaz de acelerar feixes à pelos menos 100 MeV de energia.

O comprimento do injetor do LINAC, onde o feixe é produzido, até a saída do feixe é de aproximadamente 15 m. A planta baixa do projeto cobre 900 m² e será construída em dois níveis. Além disso, o paciente será posicionado verticalmente e, ligado à estrutura de suporte do paciente, haverá um scanner para tomografia computadorizada (CT) para obter imagens do paciente, a fim de garantir maior segurança ao tratamento. É importante destacar que, inicialmente, o projeto prevê de um único feixe, mas com espaço para futuros aprimoramentos, como múltiplos feixes.

Figura 2.26: Visão zenital do LINAC e da sala de tratamento.



Fonte: C. Rossi et al. [22].

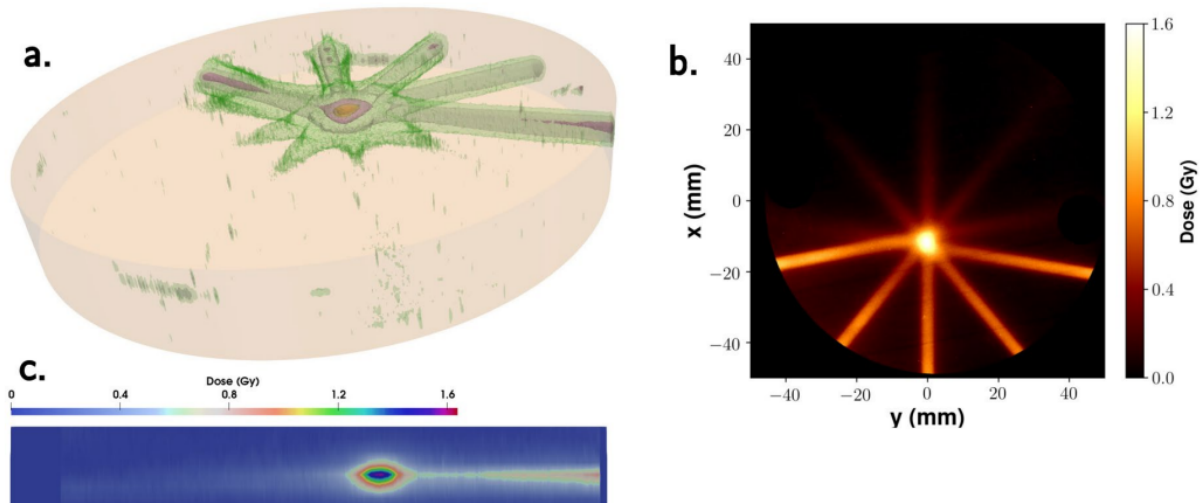
2.5.2 LWFA

Enquanto os LINACs utilizam uma tecnologia de RF para acelerar os elétrons, alguns estudos exploram a possibilidade de substituir essa tecnologia por outra que utiliza um laser. O argumento principal a favor do desenvolvimento dessa nova tecnologia é a maior compactidade do equipamento, visto que a distância necessária para produzir VHEE seria da escala de centímetros (cm).

A Aceleração Laser-Wakefield (LWFA) consiste no disparo de um pulso ultracurto de um laser poderoso em um gás. Quando isso acontece, a força ponderomotiva do laser, que empurra as partículas da região de luz do laser mais intensa para a menos intensa, empurra os elétrons para frente enquanto os íons, que são mais pesados, ficam para trás. Essa separação de cargas cria uma "bolha", ou um *Wakefield* (campo de ondas), na qual os elétrons surfam e são acelerados [23].

Em 2004, J. Faure et al. [23] produziram um artigo que mostrou ser possível produzir feixes de elétrons quase monoenergéticos (170 ± 20 MeV) e de alta qualidade com lasers, o que até então não era possível, visto que os feixes produzidos por aceleração à laser tinham um espalhamento de energia severo (geralmente de 100%), o que tornava seu uso clínico inviável. Após conduzirem experimentos e realizarem simulações, os pesquisadores chegaram à conclusão de que o uso de pulsos de laser com comprimento $c\tau$ (c é a velocidade da luz e τ é o período do pulso) menor que o comprimento de onda λ_p do plasma favorece a produção de feixes monoenergéticos e de alta qualidade. Dessa forma, caso os parâmetros do laser e do plasma (densidade) sejam definidos corretamente, a LWFA se torna confiável.

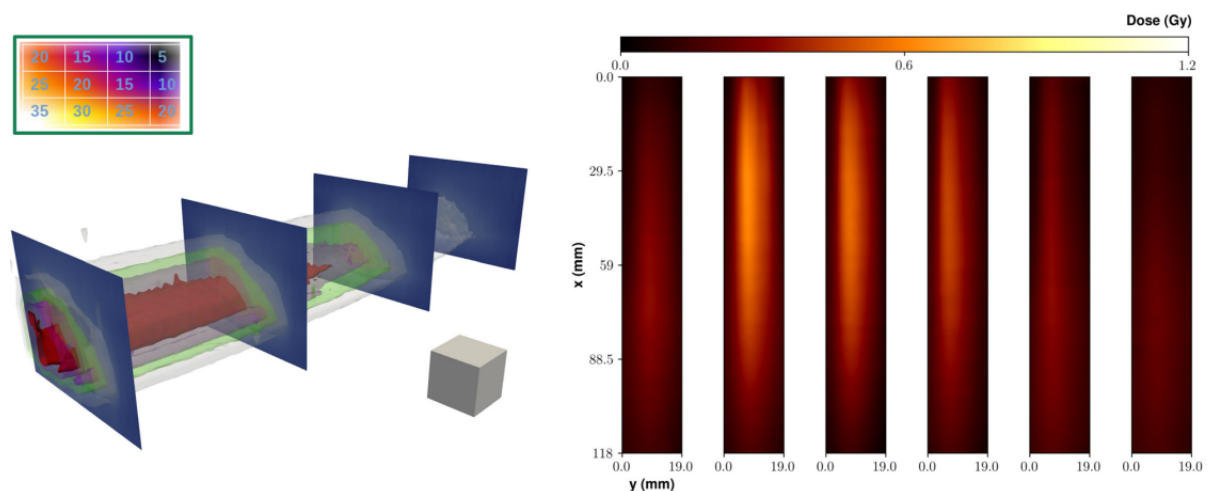
Figura 2.27: Simulação de múltiplos feixes com método Monte Carlo em um fantoma (a) composto por finos discos (2 mm de espessura) de polycarbonato. (a) Superfícies de isodose: verde: 0,2 Gy; cinza: 0,4 Gy; rosa: 0,8 Gy; amarelo: 1,2 Gy; vermelho: 1,4 Gy. (b) Plano YX ao longo do eixo z, na posição do feixe. (c) Plano XZ ao longo do eixo y, na posição do centro do campo central.



Fonte: L. Labate et al. [24].

Já um estudo mais recente, de 2020, de L. Labate et al. [24], investigou a viabilidade do uso de VHEE produzidos por LWFA para a radioterapia por meio de simulações com o método Monte Carlo e a biblioteca GEANT4. Especificamente, esse estudo investigou a dosimetria de feixes guiados por laser em simulações de feixe único, de radioterapia de intensidade modulada (IMRT) e de irradiação com múltiplos feixes, como visto nas Figuras 2.27 e 2.28. Segundo os autores, uma planta baixa de uma máquina de radioterapia cujo sistema de aceleração é de plasma/laser seria de aproximadamente 10 m^2 (90 vezes menor que o DEFT), detalhe que oferecería melhor compactidade e custo-benefício. Por fim, o estudo concluiu que, ainda que os parâmetros de LWFA devam ser melhor definidos, a modalidade se apresenta pronta para estudos pré-clínicos.

Figura 2.28: Quadro no canto superior esquerdo: número de feixes irradiados em uma matriz 3×4 de posições; a distância entre as posições é de 3 mm. Imagem à esquerda: superfícies de isodose para valores de dose selecionados no experimento de Intensidade Modulada (IM). Vermelho: 1,0 Gy; rosa: 0,8 Gy; verde: 0,6 Gy; cinza: 0,4 Gy. Um cubo de 5 mm de lado é representado como referência espacial. Imagem à direita: mapas 2D da distribuição da dose coletada em cada filme radiocrômico. A distância entre camadas adjacentes é de 2 mm.



Fonte: L. Labate et al. [24].

2.5.3 PHASER

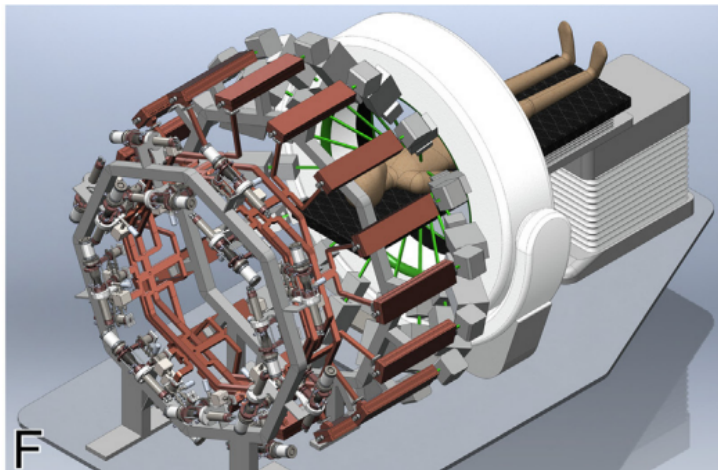
O PHASER (*Pluridirectional High-energy Agile Scanning Electronic Radiotherapy*) [25] é um projeto de uma máquina inovadora para tratamentos clínicos de radioterapia FLASH. Ela é desenvolvida em conjunto pela *Indiana University School of Medicine*, *SLAC National Accelerator Laboratory* e *Stanford University School of Medicine*. Seu principal objetivo é construir uma máquina de radioterapia capaz de entregar doses ultra-altas ($\geq 40 \text{ Gy/s}$) de raios X e até mesmo de VHEE, além de oferecer compactidade, segurança e tratamento de intensidade modulada.

A grande limitação das máquinas convencionais para realizar tratamentos mais avançados, como IMRT, em radioterapia FLASH é que elas usufruem de artifícios mecânicos, como os

colimadores de múltiplas lâminas (MLC) e os braços mecânicos que rotacionam o feixe. Esses mecanismos não são capazes de se ajustar para uma modalidade tão rápida assim. Portanto, um dos detalhes mais interessantes do projeto é a distribuição de saídas de feixes não coplanares. São 16 saídas que possuem um alvo de conversão em cada e são direcionadas de forma que suas direções pertençam à superfície de um cone cujo ponto máximo pertence ao mesmo isocentro do equipamento de tomografia computadorizada (CT) utilizado para monitorar a qualidade do feixe e andamento do tratamento.

Além disso, os LINACs convencionais são limitados por seu sistema de RF ineficiente em altos gradientes. De acordo com alguns estudos, descobriu-se que a queda na eficiência e o aumento da perda de energia deviam-se aos altos picos de campos magnéticos nas superfícies da estrutura de aceleração. Esses campos provocam excitação e até mesmo ionização dos materiais, o que causa um aumento drástico de temperatura nos componentes. No sistema de aceleração DRAGON (*Distributed RF-coupling Architecture with Genetically Optimized cell design*), a geometria das células de aceleração foi otimizada para minimizar os picos de campo magnético nos materiais. Isso causou grande impacto na eficiência do sistema de aceleração, que foi de 80% comparada a 18% (RF banda S) e a 45% (RF banda X), ou seja, mais energia foi destinada ao feixe e houve menos perdas em forma de calor.

Figura 2.29: Renderização conceitual do sistema integrado do PHASER.

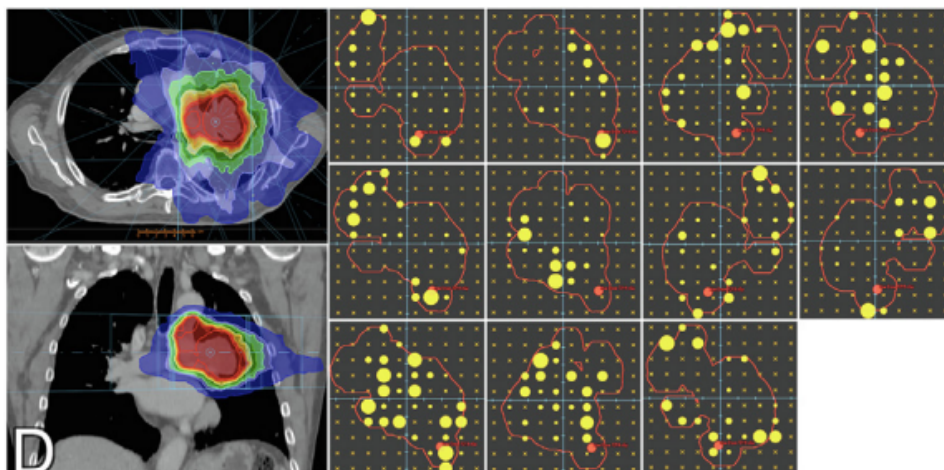


Fonte: Maxim et al. [25].

Para que o sistema de aceleração funcionasse e fosse condizente com as estruturas de máquinas atuais, foram desenvolvidas fontes de potência de RF compactas, potentes e que operam em voltagens moderadas, chamadas klystrinos. O sistema integrado da máquina consiste, então, em 16 klystrinos (entradas) e 16 LINACs (saídas). Para descartar a necessidade de um braço mecânico e conferir maior conformidade de dose no tratamento, a *RF phased-Array Power Distribution (RAPiD) network* é uma rede de distribuição de energia por matriz de fase que direciona a potência de todos os 16 klystrinos para qualquer uma das 16 saídas (LINACs) por vez. Dessa forma, quando um LINAC atira seu feixe, o RAPiD transfere a potência para o LINAC seguinte em menos de 300 nanossegundos e assim por diante.

Para o tratamento de intensidade modulada, o estudo desenvolveu o *Scanning Pencil-beam High-speed Intensity-modulated X-ray source (SPHINX)*. O SPHINX é um sistema capaz de modular o formato do feixe e a sua entrega. Primeiramente, o feixe de elétrons é direcionado eletromagneticamente e atinge um alvo de conversão extenso (como uma placa), onde há produção de raios X. Então, os raios X atravessarão canais específicos de um bloco de tungstênio no local em que ocorreu a interação com o alvo de conversão, formando feixes de raios X extremamente finos que irradiarão o tumor (*pencil-beam*). A intensidade desses feixes é modulada pela intensidade do feixe de elétrons que interagiu com aquele ponto específico no alvo de conversão. Dessa forma, o PHASER soluciona a inviabilidade do uso de um colimador de múltiplas lâminas. O foco desse projeto é para tratamentos com raios X de alta voltagem. No entanto, os autores deixaram clara a possibilidade de um PHASER de segunda geração para o tratamento com VHEE (100-200 MeV).

Figura 2.30: Simulação de planejamento IRMT com base no sistema SPHINX com cálculo de dose com método Monte Carlo. Plano de tratamento para câncer pulmonar avançado. Plano de isodose e vista da atuação de cada um dos 11 LINACs utilizados.



Fonte: Maxim et al. [25].

2.6 FUTURO DA RADIOTERAPIA FLASH

Até o momento, percebe-se que muitos estudos pré-clínicos devem ser conduzidos para investigar a ocorrência do efeito protetivo FLASH nos demais tecidos, as janelas terapêuticas da modalidade, os protocolos de dosimetria e o mecanismo por trás desse efeito.

Por um lado, a FLASH-RT e seus benefícios em relação à CONV-RT foram bem observados em diversos experimentos com murinos — com destaque para o estudo de V. Favaudon et al. [8] com feixes de elétrons, de Shukla et al. [21] com feixes de prótons — e até mesmo com miniporcões. Por outro lado, os resultados não foram satisfatórios no tratamento de câncer oral de caninos, o qual resultou em osteonecrose severa. Isso imediatamente levantou questões acerca da universalidade do efeito e de suas limitações quanto aos diferentes tipos de tecidos.

De fato, uma das grandes barreiras para o avanço da FLASH-RT é a maior complexidade e heterogeneidade dos sistemas humanos. Portanto, muitos estudos ainda serão necessários para investigar a sua viabilidade clínica e possíveis protocolos de dosimetria para uma maior segurança do tratamento [26].

Sobre o mecanismo do efeito FLASH, a hipótese do sequestro de radicais livres e da depleção de oxigênio ainda não explica as evidências imunomoduladoras provocadas por tratamentos com UHDR [21]. Além disso, existe uma certa desconfiança quanto à depleção de oxigênio ser o fator decisivo para o efeito FLASH, visto que, em mamíferos de maior porte, como os humanos, os níveis de oxigenação nos tecidos saudáveis e, até mesmo no volume tumoral, não são necessariamente homogêneos, devido a diferentes níveis de vascularização. Portanto, o mecanismo por trás do efeito FLASH ainda não é completamente compreendido.

As máquinas em uso atualmente capazes de produzir feixes de UHDR são dedicadas aos estudos pré-clínicos. Nesse viés, os novos avanços tecnológicos e os novos projetos de máquinas para a FLASH-RT são notáveis, mas ainda existem desafios, principalmente quanto à FLASH-RT com prótons. Os principais problemas envolvem a capacidade de acompanhar a dosimetria do tratamento em tempo real, visto que as câmaras de ionização são completamente saturadas com UHDR, e o monitoramento por imagem, devido à curta duração do tratamento. A FLASH-RT com prótons tem sua potencialidade limitada pelo tempo de tratamento com UHDR, pois a modulação do feixe para o uso de técnicas como o *Spread-Out Bragg Peak* exige um tempo maior do que a duração da FLASH-RT. Para contornar temporariamente esse detalhe, utiliza-se o *pencil-beam scanning*, pois, assim, é possível tratar todo o volume tumoral com maior precisão. No entanto, isso significa que não há proveito da grande vantagem do pico de Bragg, que é concentrar toda a dose no tumor, sem radiação de saída [27].

Y. Di et al. [20] sugerem a implementação de inteligência artificial para reajustes de tratamento, previsão de zonas de hipóxia transitória e otimização do feixe em períodos de tempo curtos. Além disso, os autores ressaltam a possibilidade de personalizar o tratamento dos pacientes com base nos níveis de oxigenação de seus tecidos, a fim de maximizar a eficácia do efeito FLASH e minimizar os efeitos colaterais.

3 METODOLOGIA

Seguindo com o objetivo de explorar a hipótese do sequestro de radicais livres e da depleção de oxigênio, foram conduzidas simulações computacionais com método Monte Carlo, com o programa TOPAS e a sua extensão TOPAS-nBio. Essas simulações analisaram o consumo de O_2 e a cinética de produção de H_2O_2 em três diferentes concentrações de O_2 para dois tipos de feixe, um de elétrons e outro de prótons, a fim de analisar um dos possíveis mecanismos biológicos do efeito FLASH.

3.1 MONTE CARLO

Monte Carlo é o nome que se deu à uma classe de métodos matemáticos que foram primeiramente usados pelos cientistas durante o Projeto Manhattan, responsável pelo desenvolvimento das primeiras bombas atômicas. Esses métodos matemáticos baseavam-se na invenção de jogos de azar cujo comportamento e resultados poderiam ser aplicados para o estudo de diversos fenômenos [28].

Um método pertencente a essa classe é definido pelo uso deliberado de números aleatórios que têm estrutura estocástica, isto é, cuja evolução de seus estados é determinada por eventos completamente aleatórios e independentes. Assim, os dados convergem para um resultado, de forma que, quanto mais dados são gerados, mais precisa é essa aproximação.

O exemplo mais simples de um método como este é o cálculo aproximado de π a partir da área de uma circunferência de raio r inscrita em um quadrado de lado $2r$. Para este cálculo, deve-se colocar, aleatoriamente, pontos na região do quadrado e, então, a probabilidade $P(n)$ de qualquer ponto ser encontrado dentro da circunferência é

$$P(n) = \frac{\pi r^2}{4r^2} = \frac{\text{nº de pontos dentro}}{\text{nº total de pontos}} \quad (3.1)$$

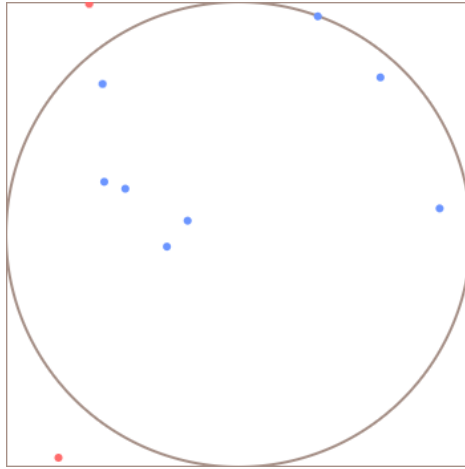
Assim, a aproximação de π será dada por

$$\pi = P(n) \cdot 4 \quad (3.2)$$

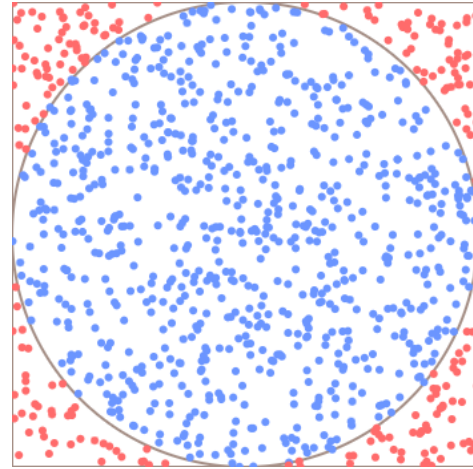
No entanto, o resultado não será satisfatório caso sejam posicionados apenas 10 pontos, por exemplo. Da mesma forma que em experimentos físicos quanto mais medidas são realizadas, menor é o desvio padrão, quanto mais eventos aleatórios forem considerados ou simulados, mais o resultado convergirá para o valor verdadeiro de π . Esse é o princípio básico de um método Monte Carlo. A Figura 3.1 mostra esse exemplo para 10 pontos e para 1000 pontos.

Para a física de radiações, o método Monte Carlo é utilizado de forma que a ocorrência de eventos físicos e químicos é regida por modelos matemáticos da probabilidade de interações no meio. No entanto, isso não faz com que o sistema perca sua característica de evolução estocástica, visto que os eventos de uma sequência de interações físicas são completamente independentes entre si. A aleatoriedade é preservada, mas com as probabilidades modeladas a partir de métodos e resultados experimentais.

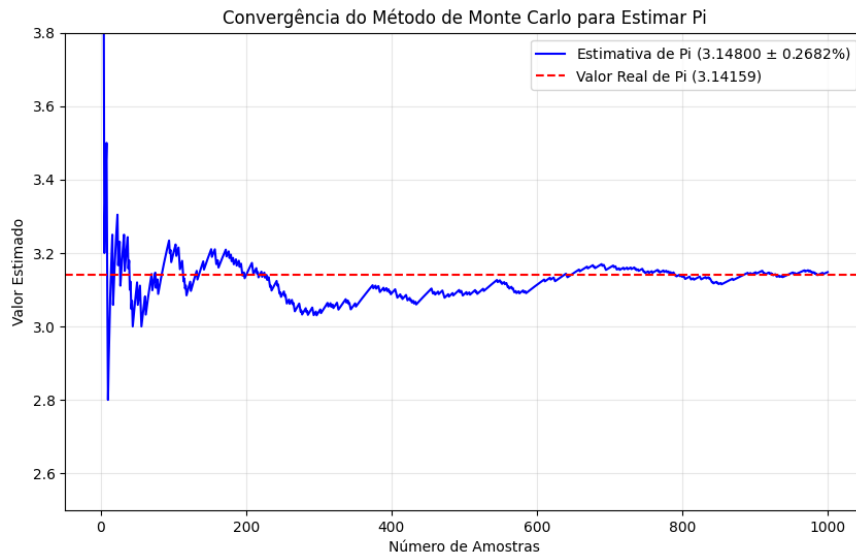
Figura 3.1: Estimativa de π pelo método Monte Carlo. Em (a) e (b), as distribuições espaciais de pontos. Em (c), a convergência do valor estimado em função do número de amostras (estimativa final de $3,14800 \pm 0,2682\%$, com diferença relativa ao esperado de $0,2040\%$).



(a) 10 pontos aleatórios



(b) 1000 pontos aleatórios



(c) Convergência do método até 1000 amostras

Fonte: Elaborado pelo autor.

3.2 SIMULAÇÕES

As simulações foram feitas com o programa TOPAS, que é baseado no GEANT4, e a sua extensão TOPAS-nBio. Para as simulações, foi utilizada uma máquina de especificações: CPU Ryzen 9 5950X 16 núcleos, GPU RTX 3060 12 Gb e RAM 128 Gb; e programas: Ubuntu 24.04 LTS, TOPAS 4.0 com extensão nBio 4.0, geant4 v11.1.3.

Para simular o efeito FLASH e observar a depleção de oxigênio, a simulação foi separada em duas partes: o espaço de fase e a radiólise. A simulação do espaço de fase teve como objetivo simular 10 milhões de partículas para obter o espectro de energia do feixe e gerar um

espaço de fase com as informações das partículas (carga, massa, momento e posição) em uma profundidade desejada. Então, com esse espaço de fase, irradiou-se uma caixa d'água micrométrica para gerar produtos de radiólise, calcular o valor G (número de espécies químicas geradas a cada 100 eV depositados no meio) para os produtos das reações das Tabelas 3.1, 3.3 e 3.2, bem como analisar o consumo de O_2 e a cinética de produção de H_2O_2 no meio.

A divisão em uma parte macroscópica e outra microscópica foi feita para manter maior fidelidade aos protocolos clínicos de dosimetria da IAEA (*International Atomic Energy Agency*) adotados pela Agência Nacional de Segurança Nuclear (ANSN). Nesse sentido, foram irradiados feixes em cubos macroscópicos de água, com uma distância fonte-superfície de 100 cm, para analisar a dose em pontos no volume. A ideia principal era apenas obter os dados do espectro de partículas que depositam dose no eixo central na máxima dose. Portanto, o campo de irradiação de $5 \times 5 \text{ cm}^2$, que é diferente do padrão estabelecido pelos protocolos ($10 \times 10 \text{ cm}^2$), foi utilizado para obter os resultados de espectro desejados com um tempo de máquina otimizado.

Ademais, ao simular nível macroscópico, é possível capturar um espaço de fase de um feixe com maior precisão estatística, visto que mais partículas seriam registradas ali do que se a simulação fosse baseada em uma estatística de pequenas quantidades de partículas atingindo diversos microfantomas de água com várias reações químicas ocorrendo. Isso implicaria um tempo de máquina desnecessariamente alto, tendo em vista que, para obter resultados mais precisos, seriam necessários muitas microfantomas e, em seguida, seria necessário calcular a média dos valores G obtidos em todos os microfantomas.

3.2.1 ESPAÇO DE FASE

A primeira simulação consiste em uma caixa d'água de dimensões $20 \times 20 \times 20 \text{ cm}^3$ em um mundo retangular de dimensões $40 \times 40 \times 200 \text{ cm}^3$. Dentro desse fantoma, há um bloco de dimensões $10 \times 10 \times 2 \text{ cm}^3$ cujo plano mais próximo da superfície irradiada registrava as informações das partículas desejadas (carga, massa, momento e posição) em uma área de $10 \times 10 \text{ cm}^2$. Foram simulados dois tipos de feixe: um feixe de prótons e outro de elétrons, nos quais ambos os feixes possuíam um campo de irradiação de $5 \times 5 \text{ cm}^2$, distribuição gaussiana de energia com desvio-padrão de 1%, e as fontes foram posicionadas a 100 cm da superfície do fantoma de água.

Para simular o feixe de elétrons, foi utilizado um feixe de 12 MeV; o plano do espaço de fase foi configurado para gravar as informações apenas dos elétrons com energia acima de 10 eV e foi estrategicamente posicionado em sua profundidade de máxima dose (3,4 cm). As imagens na Figura 3.2 mostram a configuração de geometria utilizada e o feixe de elétrons.

Figura 3.2: Imagens frontal (esquerda) e em perfil (direita) da simulação do espaço de fase para um feixe de elétrons de 12 MeV no TOPAS. Elétrons em vermelho.



Figura 3.3: Espectro do feixe de elétrons de 12 MeV na profundidade de máxima dose (3,4 cm). A soma da área do gráfico é igual a 1.

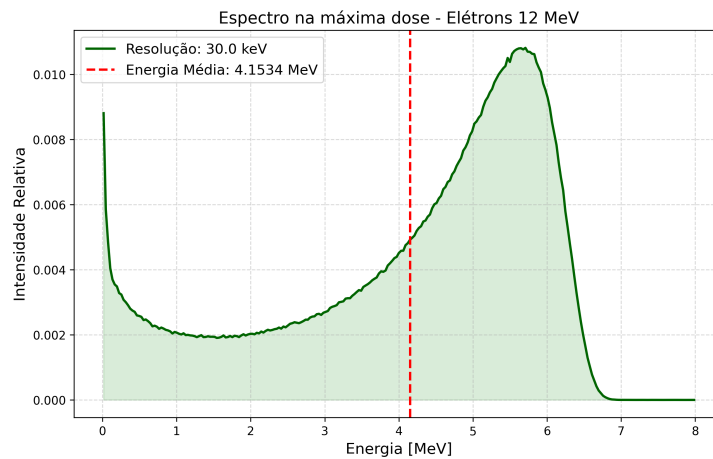


Figura 3.4: Mapa de isodose do feixe de elétrons de 12 MeV e campo 5 x 5 cm² na água.

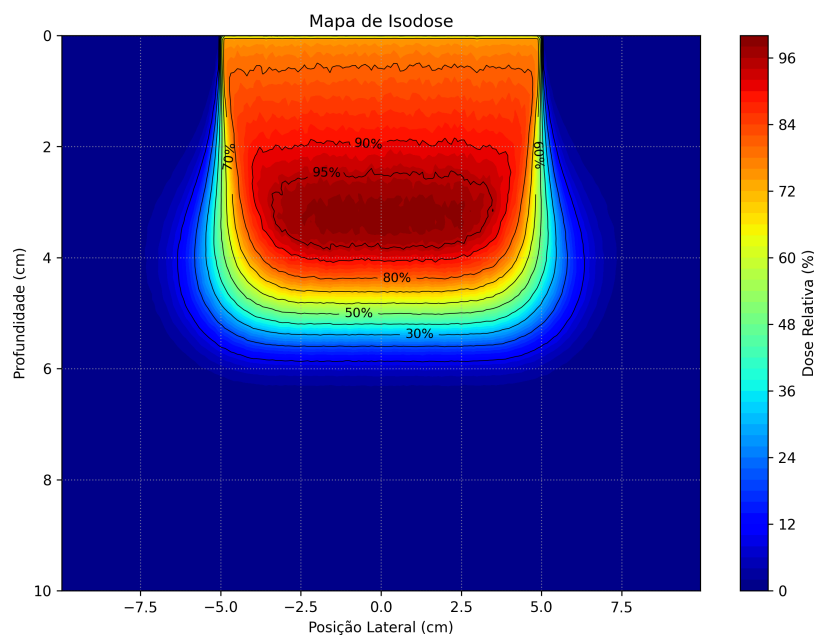
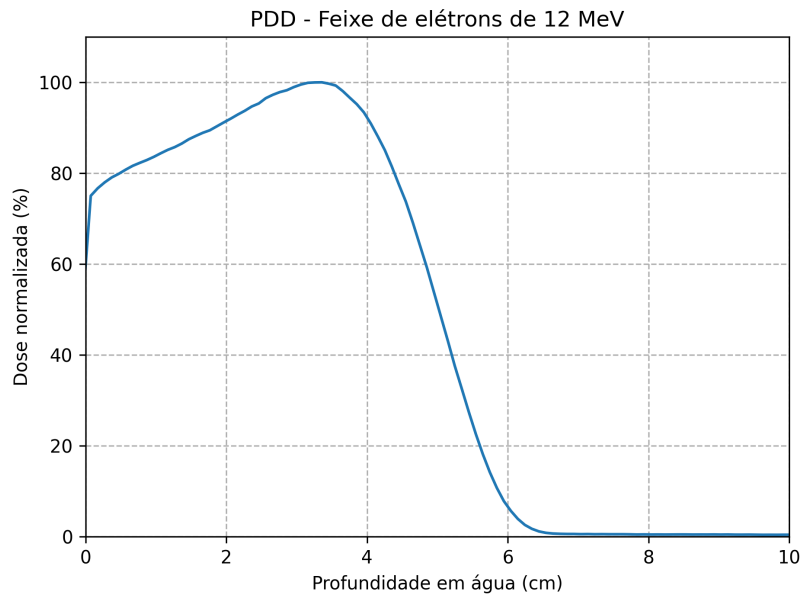


Figura 3.5: Gráfico da porcentagem de dose em profundidade (PDD) do feixe de elétrons de 12 MeV na água.



Para simular o feixe de prótons, foi utilizado um feixe de transmissão de 200 MeV; o plano do espaço de fase foi configurado para gravar as informações dos prótons e elétrons secundários (visto que também depositam energia significativa) com energia acima de 10 eV. O plano foi posicionado para capturar as informações em uma profundidade de 10 cm, definida para representar um exemplo de tumor profundo. As imagens na Figura 3.6 mostram a configuração de geometria utilizada e o feixe de prótons.

Figura 3.6: Imagens frontal (esquerda) e em perfil (direita) da simulação do espaço de fase para um feixe de transmissão de prótons de 200 MeV no TOPAS. Prótons em azul e elétrons em vermelho.

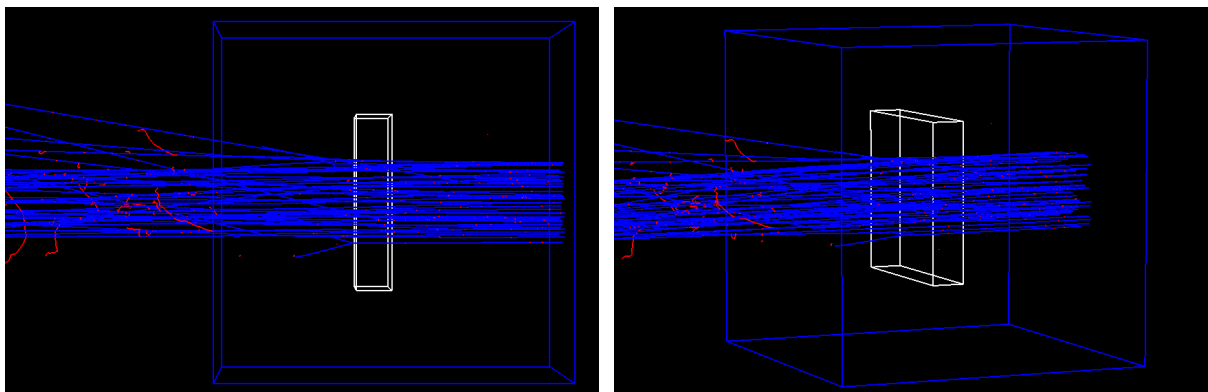
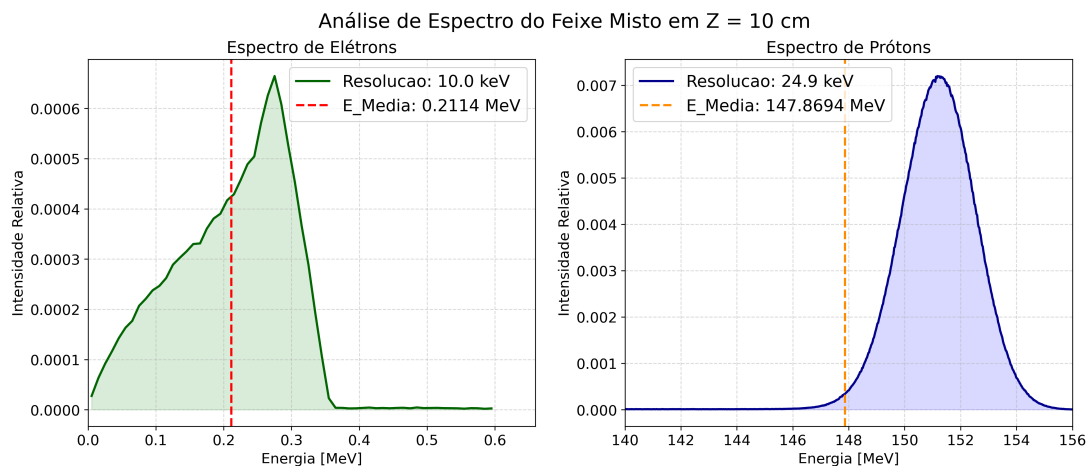


Figura 3.7: Espectro do feixe misto de prótons e raios delta (elétrons secundários). A soma da área dos dois gráficos é igual a um. A intensidade do espectro dos raios delta está relativa à ao feixe de prótons.



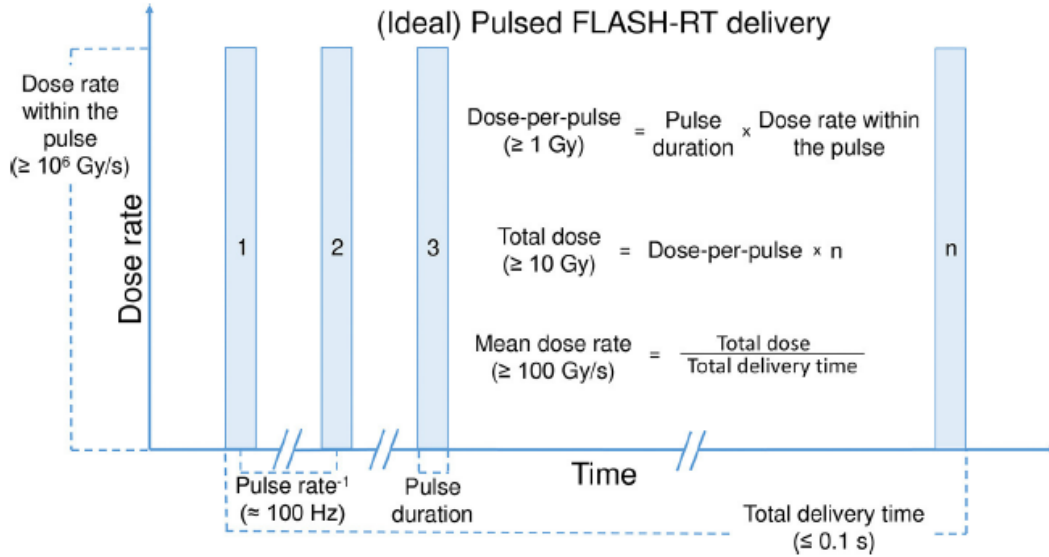
3.2.2 RADIÓLISE

Em seguida, utilizaram-se as informações das partículas gravadas e o programa TOPAS-nBio para irradiar uma caixa d'água de dimensões $3 \times 3 \times 3 \mu\text{m}^3$. Essa caixa consitui o próprio alvo da simulação e possui as mesmas dimensões do mundo. A fonte do feixe foi posicionada no plano da caixa, incidindo perpendicularmente sobre ela. Para simular as diferentes modalidades da radioterapia (CONV e FLASH), foi estipulada uma dose total e foram controlados o tempo de irradiação e os parâmetros dos pulsos.

A partir dos dados obtidos, foram gerados gráficos do consumo de O_2 e da produção de H_2O_2 . Os dados de consumo de O_2 não são calculados diretamente pelo programa em valores G; no entanto, eles podem ser obtidos indiretamente somando-se os valores G (ou rendimento químico da radiólise - quantidade de espécies químicas produzidas ou consumidas por unidade de energia absorvida pela radiação) dos produtos de todas as reações que consomem O_2 . Por outro lado, a produção de H_2O_2 foi obtida diretamente, apenas identificando a espécie química no fantoma. Foram utilizados três níveis de concentração distintos de oxigênio: $5 \mu\text{M}$, para simular um tumor hipóxico; $40 \mu\text{M}$, para simular um tecido normóxico; e $250 \mu\text{M}$, para simular um ambiente *in vitro*.

Os feixes, na simulação de radiólise, foram irradiados em pulsos discretos no tempo, conhecidos como pulsos de irradiação, como exemplificados na Figura 3.8. Fisicamente, isso ocorre porque o sistema de injeção de elétrons e prótons operam de forma pulsada. Cada pulso tem uma duração finita, chamada de tempo de pulso (τ), e o intervalo entre esses pulsos é determinado pela taxa de pulso (*pulse rate*).

Figura 3.8: Entrega (ideal) de FLASH-RT com pulsos. Um esquema da entrega de um feixe pulsado, especificando alguns parâmetros que parecem ser importantes para a indução do efeito FLASH.



Fonte: Joseph D. Wilson et al. [29].

As configurações de pulso foram as mesmas para o feixe de elétrons e para o feixe de prótons, tanto para as taxas de dose convencionais quanto para as taxas de dose ultra-altas. Foram utilizados 10 pulsos com distribuição uniforme em taxa de dose, com frequência de 100 Hz, de largura à meia-altura do pulso igual ao tempo de pulso.

Para uma melhor análise gráfica, converteu-se a unidade de medida original do valor G de [moléculas/100 eV] para [$\mu\text{M}/\text{Gy}$], em que M é a concentração molar. Como $1 \text{ Gy} = 1 \text{ J/kg}$ e o fantoma da radiólise continha água, a energia depositada por litro segue a relação $1 \text{ J/kg} = 1 \text{ J/L}$. Dado que $1 \text{ eV} = 1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ J}$, em 1 Gy de energia absorvida, obtém-se a seguinte quantidade n de pacotes de 100 eV por litro:

$$n = \frac{1}{1,6022 \cdot 10^{-17}} \approx 6,2414 \cdot 10^{16} \left[\frac{\text{pacotes}}{\text{L}} \right] \quad (3.3)$$

Agora, para o cálculo do novo valor G (G') em $\mu\text{M}/\text{Gy}$, multiplica-se o fator G pela quantidade n e por 10^6 e divide-se o resultado pelo Número de Avogadro ($N_A = 6,0221 \cdot 10^{23}$ moléculas/mol):

$$G' = G \cdot \frac{6,2414 \cdot 10^{16} \cdot 10^6}{6,0221 \cdot 10^{23}} = G \cdot 0,10364 \left[\frac{\mu\text{M}}{\text{Gy}} \right] \quad (3.4)$$

Os valores G já são normalizados por dose total irradiada. Portanto, a comparação entre as modalidades e os níveis de oxigenação não depende da dose total das simulações individuais.

Para a simulação da radiólise, foram utilizadas as reações e taxas de reação descritas nas Tabelas 3.1, 3.2 e 3.3 com base no manuscrito de D-Kondo et al. [30].

Tabela 3.1: Lista das reações padrão do TOPAS para água líquida pura utilizadas para o cálculo dos valores G na simulação da radiólise. 1 M = 1 mol/dm³.

Índice	Reação	Taxa de reação (M ⁻¹ s ⁻¹)
R1	$H_3O^+ + OH^- \rightarrow H_2O$	$14,3 \times 10^{10}$
R2	$H^\bullet + H^\bullet \rightarrow H_2$	$7,8 \times 10^9$
R3	$H^\bullet + \bullet OH \rightarrow H_2O$	2×10^{10}
R4	$H + H_2O_2 \rightarrow \bullet OH$	9×10^7
R5	$H^\bullet + e_{aq}^- \rightarrow H_2 + OH^-$	$2,5 \times 10^{10}$
R6	$\bullet OH + \bullet OH \rightarrow H_2O_2$	$5,5 \times 10^9$
R7	$\bullet OH + e_{aq}^- \rightarrow OH^-$	3×10^{10}
R8	$H_2O_2 + e_{aq}^- \rightarrow OH^- + \bullet OH$	$1,1 \times 10^{10}$
R9	$e_{aq}^- + e_{aq}^- \rightarrow 2OH^- + H_2$	$5,5 \times 10^9$
R10	$e_{aq}^- + H_3O^+ \rightarrow H$	$2,3 \times 10^{10}$

Fonte: D-Kondo et al. [30].

Tabela 3.2: Reações extras para produção de H₂O₂ (Reações de fundo).

Índice	Reação	Taxa de reação (s ⁻¹)
RF1	$e_{aq}^- + H_3O^+ \rightarrow H$	$2,3 \times 10^{10}$
RF2	$H_3O^+ + OH^- \rightarrow H_2O$	$14,3 \times 10^{10}$
RF3	$HO_2 \rightarrow H^+ + O_2^-$	$8,05 \times 10^5$
RF4	$e_{aq}^- + O_2 \rightarrow O_2^-$	$1,9 \times 10^{10}$
RF5	$H + O_2 \rightarrow HO_2$	$2,1 \times 10^{10}$

Fonte: D-Kondo et al. [30].

Tabela 3.3: Lista das reações extra para a produção de H₂O₂ utilizadas para o cálculo dos valores G na simulação da radiólise. 1 M = 1 mol/dm³.

Índice	Reação	Taxa de reação (M ⁻¹ s ⁻¹)
RE1	$H_3O^+ + O_2^- \rightarrow HO_2$	5×10^{10}
RE2	$e_{aq}^- + O_2 \rightarrow O_2^-$	$1,9 \times 10^{10}$
RE3	$H + O_2 \rightarrow HO_2$	$2,1 \times 10^{10}$
RE4	$HO_2 + HO_2 \rightarrow H_2O_2 + O_2$	$8,3 \times 10^5$
RE5	$HO_2 + O_2^- \rightarrow H_2O_2 + O_2 + OH^-$	$9,7 \times 10^7$
RE6	$O_2^- + O_2^- \rightarrow H_2O_2 + O_2 + OH^-$	$4,9 \times 10^3$
RE7	$HO_2 + OH \rightarrow O_2 + H_2O$	6×10^9
RE8	$O_2^- + OH \rightarrow O_2 + OH^-$	$8,2 \times 10^9$
RE9	$e_{aq}^- + HO_2 \rightarrow H_2O_2 + OH^-$	2×10^{10}
RE10	$e_{aq}^- + O_2^- \rightarrow H_2O_2 + 2OH^-$	$1,3 \times 10^{10}$
RE11	$H + HO_2 \rightarrow H_2O_2$	$1,5 \times 10^{10}$
RE12	$H + O_2^- \rightarrow H_2O_2 + OH^-$	$1,8 \times 10^{10}$
RE13	$HO_2 + H_2O_2 \rightarrow OH + O_2$	5×10^{-1}
RE14	$O_2^- + H_2O_2 \rightarrow OH + O_2 + OH^-$	$1,3 \times 10^{-1}$
RE15	$OH + H_2 \rightarrow H + H_2O$	$4,3 \times 10^7$
RE16	$OH + H_2O_2 \rightarrow O_2^- + H_3O^+$	$2,7 \times 10^7$

Fonte: D-Kondo et al. [30].

Para a simulação de taxas de dose convencionais com o feixe de elétrons, utilizou-se uma dose total de 10 Gy, tempo de irradiação de 50 s e taxa de dose de 0,2 Gy/s, com um tempo de simulação química de 1 ps até 150 s após a irradiação. A escolha da taxa de 0,2 Gy/s baseou-se no tempo de máquina e no LINAC TrueBeam da Varian (Figura 2.25), cuja taxa de dose máxima para um feixe de elétrons é de 1000 UM/min (unidades monitoras por minuto) [7]. Considerando uma calibração da máquina de 1 cGy/UM, essa taxa máxima equivale a aproximadamente 0,167 Gy/s. Adicionalmente, a modelagem das taxas de dose ultra-altas envolveu uma dose total de 15 Gy, tempo de irradiação de 90 ms e taxa de dose de 166,67 Gy/s [19]. Para esta configuração, o tempo de simulação química estendeu-se de 1 ps até 75 s pós-irradiação. Em contrapartida, para configurar o feixe de prótons, um arranjo para as taxas convencionais foi estruturado com dose total de 20 Gy, tempo de irradiação de 50 s e taxa de dose de 0,4 Gy/s (conforme utilizado por Zhang et al. [31]), sendo o tempo de simulação de 1 ps até 150 s após

a irradiação. Por fim, o último cenário avaliado contemplou taxas ultra-altas com dose total de 25 Gy, tempo de irradiação de 192 ms e taxa de dose de 130 Gy/s [31]. Nesse caso, o tempo de simulação foi de 1 ps até 62,5 s após o término da irradiação.

4 RESULTADOS

Com os resultados obtidos das simulações de radiólise, foi possível explorar a depleção de O_2 e a cinética de produção de H_2O_2 sob três diferentes níveis de oxigenação: células *in vitro*, tecido normóxico e tumor hipóxico. As comparações entre as modalidades FLASH e CONV estão organizadas de acordo com a partícula primária. Os dados referentes ao feixe de elétrons encontram-se nas Figuras 4.1, 4.2 e 4.3. De forma análoga, os resultados para o feixe de prótons estão detalhados nas Figuras 4.4, 4.5 e 4.6. Em todas essas figuras, os painéis à esquerda representam o consumo de oxigênio, enquanto os painéis à direita ilustram a produção de peróxido de hidrogênio.

Figura 4.1: Gráficos de comparação entre FLASH e^- e CONV e^- do consumo de O_2 (esquerda) e da cinética de produção de H_2O_2 (direita) no ambiente *in vitro*. Linha cheia: FLASH e^- ; Linha tracejada: CONV e^- .

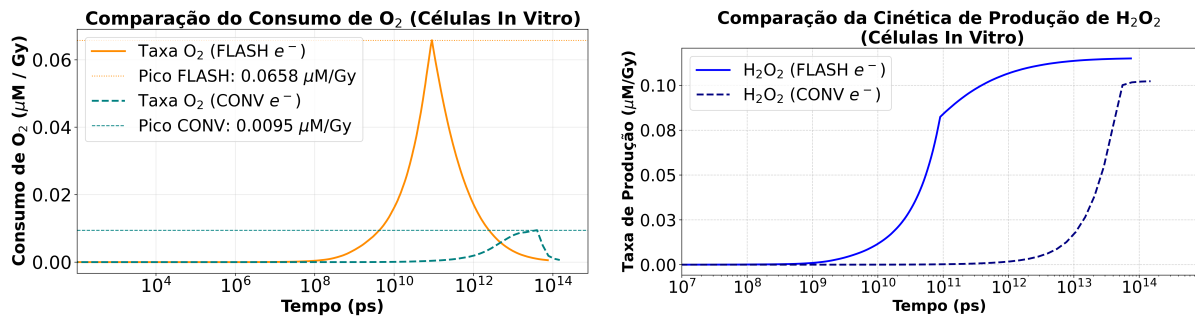


Figura 4.2: Gráficos de comparação entre FLASH e^- e CONV e^- do consumo de O_2 (esquerda) e da cinética de produção de H_2O_2 (direita) no ambiente normóxico. Linha cheia: FLASH e^- ; Linha tracejada: CONV e^- .

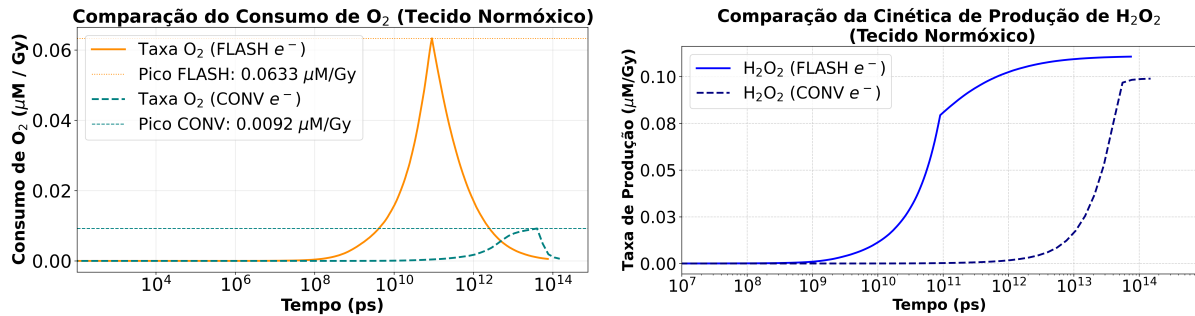


Figura 4.3: Gráficos de comparação entre FLASH e^- e CONV e^- do consumo de O_2 (esquerda) e da cinética de produção de H_2O_2 (direita) no ambiente hipóxico. Linha cheia: FLASH e^- ; Linha tracejada: CONV e^- .

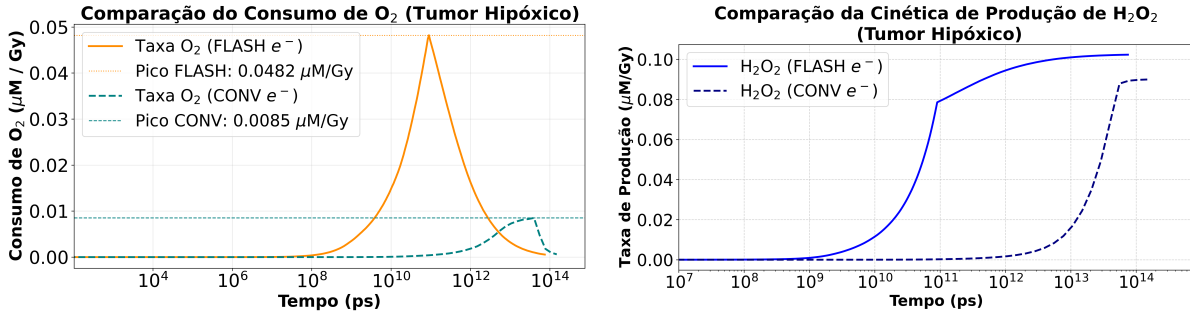


Figura 4.4: Gráficos de comparação entre FLASH próton e CONV próton do consumo de O_2 (esquerda) e da cinética de produção de H_2O_2 (direita) no ambiente *in vitro*. Linha cheia: FLASH próton; Linha tracejada: CONV próton.

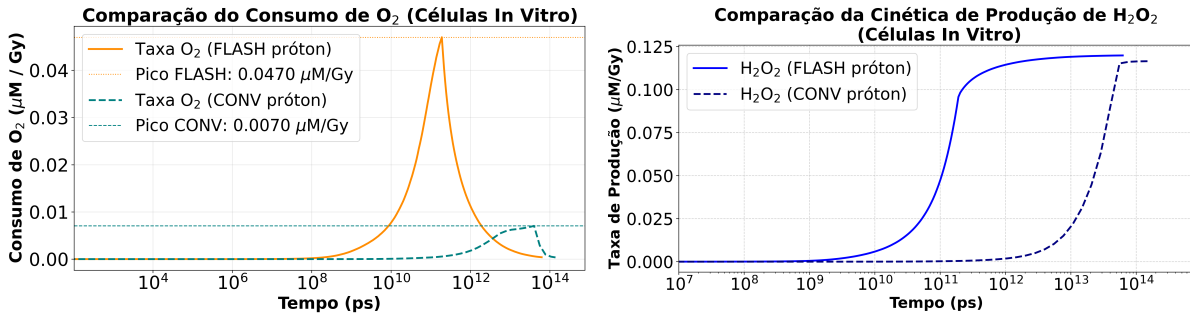


Figura 4.5: Gráficos de comparação entre FLASH próton e CONV próton do consumo de O_2 (esquerda) e da cinética de produção de H_2O_2 (direita) no ambiente normóxico. Linha cheia: FLASH próton; Linha tracejada: CONV próton.

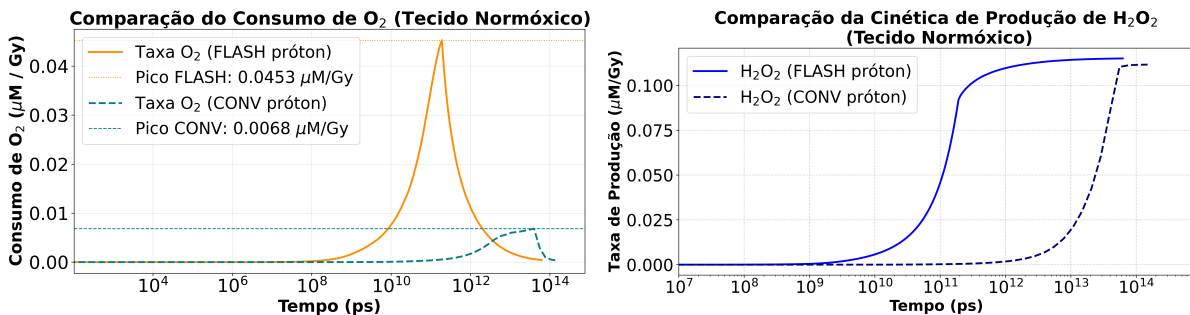


Figura 4.6: Gráficos de comparação entre FLASH próton e CONV próton do consumo de O_2 (esquerda) e da cinética de produção de H_2O_2 (direita) no ambiente hipóxico. Linha cheia: FLASH próton; Linha tracejada: CONV próton.

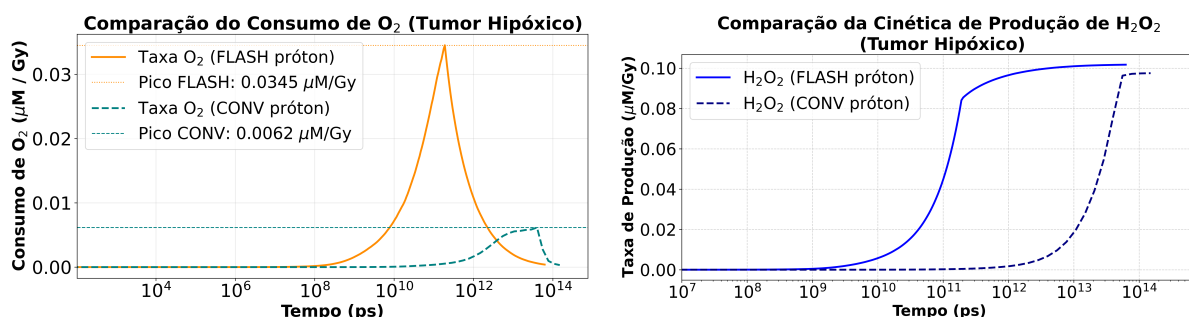
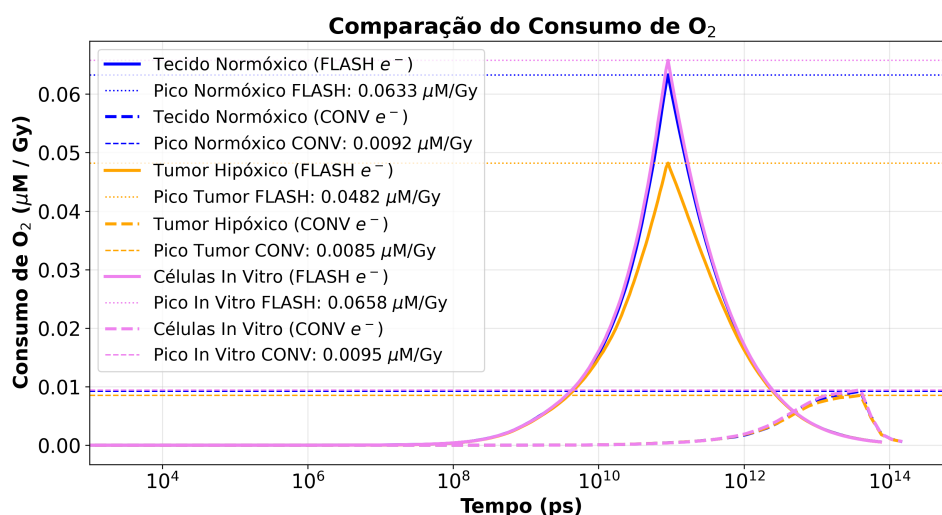
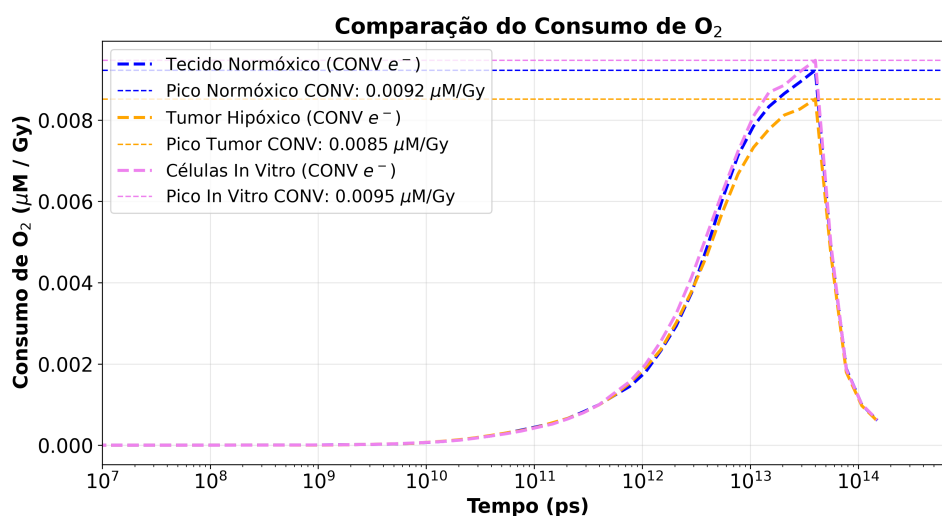


Figura 4.7: Comparação dos resultados de consumo de O_2 entre os três diferentes níveis de oxigenação e as diferentes taxas de dose para o feixe de elétrons: (a) visão geral; (b) destaque para a CONV.



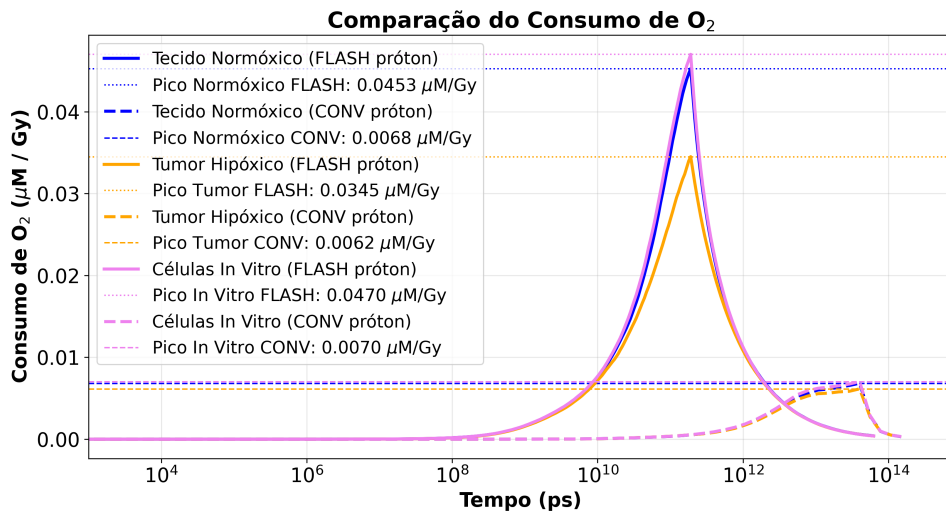
(a) Gráfico geral.



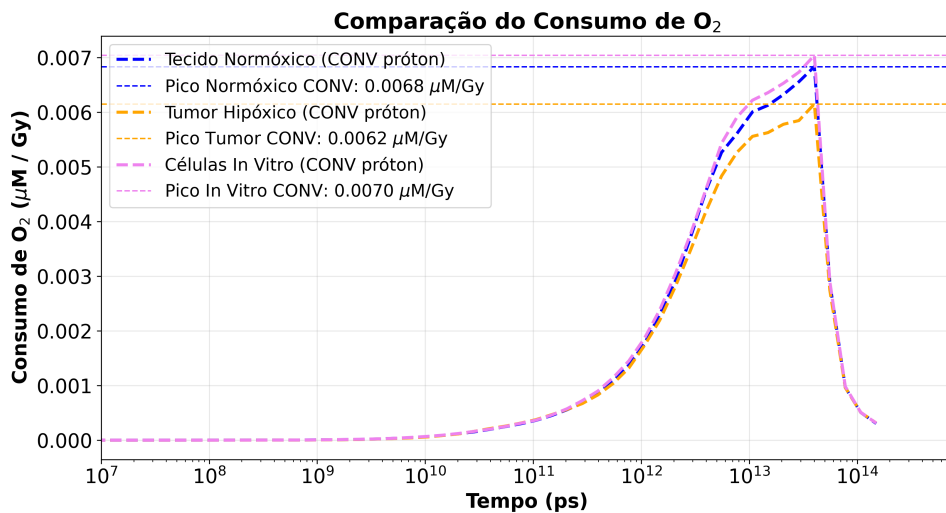
(b) Zoom para CONV.

As Figuras 4.7 e 4.8 apresentam as comparações dos resultados do consumo de O_2 entre os três ambientes distintos e entre as modalidades FLASH e CONV para o feixe de elétrons e para o feixe de prótons, respectivamente. Ademais, as Figuras 4.9 e 4.10 apresentam os dados das comparações entre os picos de consumo de O_2 . Na Figura 4.9, foi realizada a comparação dos picos de consumo de O_2 em cada um dos três diferentes ambientes entre FLASH e CONV e^- (gráfico de cima) e entre FLASH e CONV próton (gráfico em baixo). Já a Figura 4.10 exibe os resultados da comparação dos picos de consumo de O_2 em cada um dos três diferentes níveis de oxigenação entre FLASH e^- e próton e entre CONV e^- e próton. Por fim, as Figuras 4.11 e 4.12 mostram, respectivamente, as comparações dos resultados da cinética de produção de H_2O_2 entre os três ambientes distintos para o feixe de elétrons e para o feixe de prótons.

Figura 4.8: Comparação dos resultados de consumo de O_2 entre os três diferentes níveis de oxigenação e as diferentes taxas de dose para o feixe de prótons: (a) visão geral; (b) destaque para CONV.



(a) Gráfico geral.



(b) Zoom para CONV.

Figura 4.9: Gráfico da comparação dos picos de consumo de O_2 entre os feixes de próton e elétron para FLASH-RT (esquerda) e CONV-RT (direita) para os três níveis de oxigenação. Tumor hipóxico: $5 \mu M$; tecido normóxico: $40 \mu M$; células *in vitro*: $250 \mu M$.

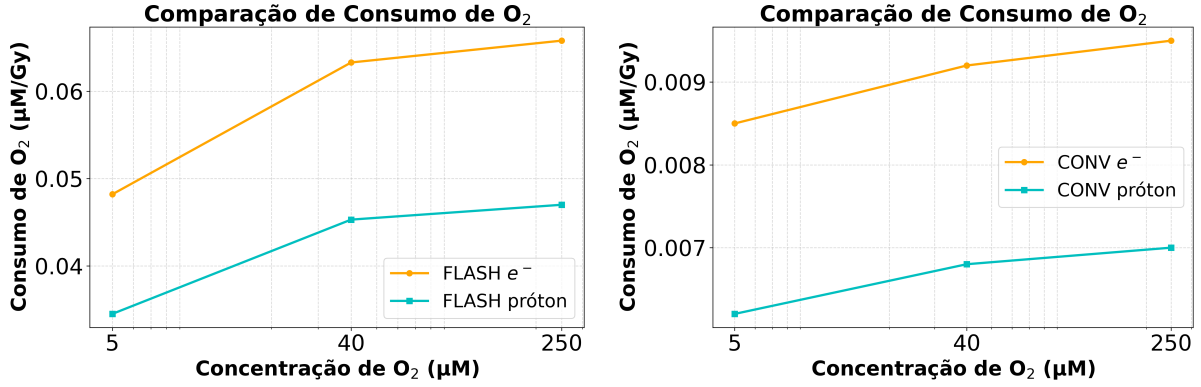


Figura 4.10: Gráficos da comparação dos picos de consumo de O_2 entre FLASH-RT e CONV-RT para os três níveis de oxigenação para feixe de elétrons (esquerda) e de prótons (direita). Tumor hipóxico: $5 \mu M$; tecido normóxico: $40 \mu M$; células *in vitro*: $250 \mu M$.

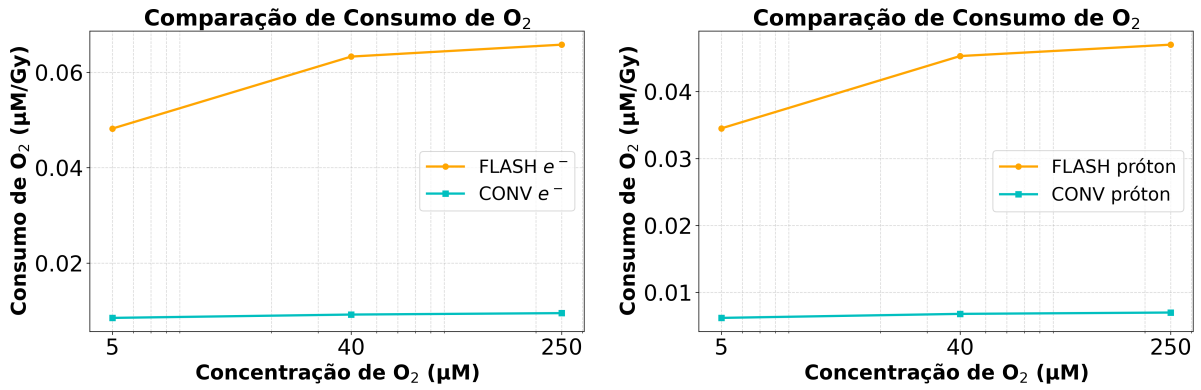


Figura 4.11: Comparação dos resultados de produção de H_2O_2 entre os três diferentes níveis de oxigenação e as diferentes taxas de dose para o feixe de elétrons.

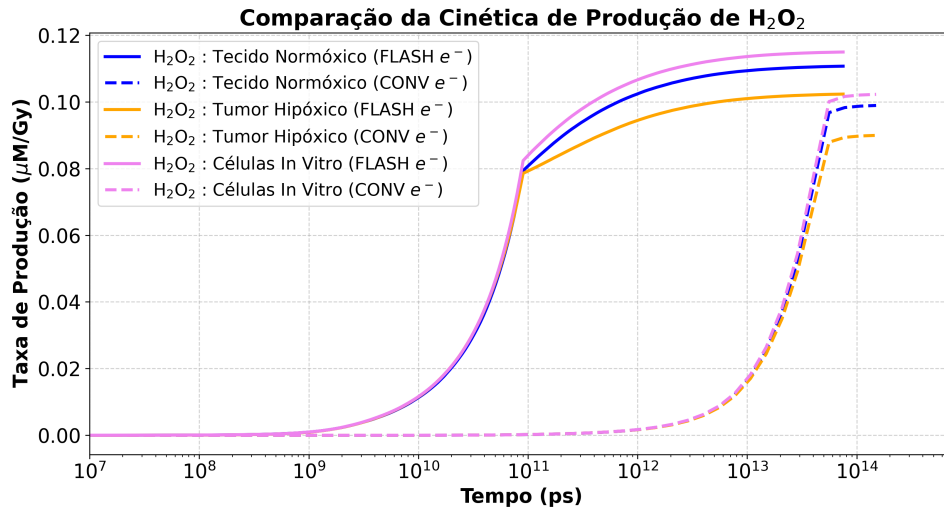
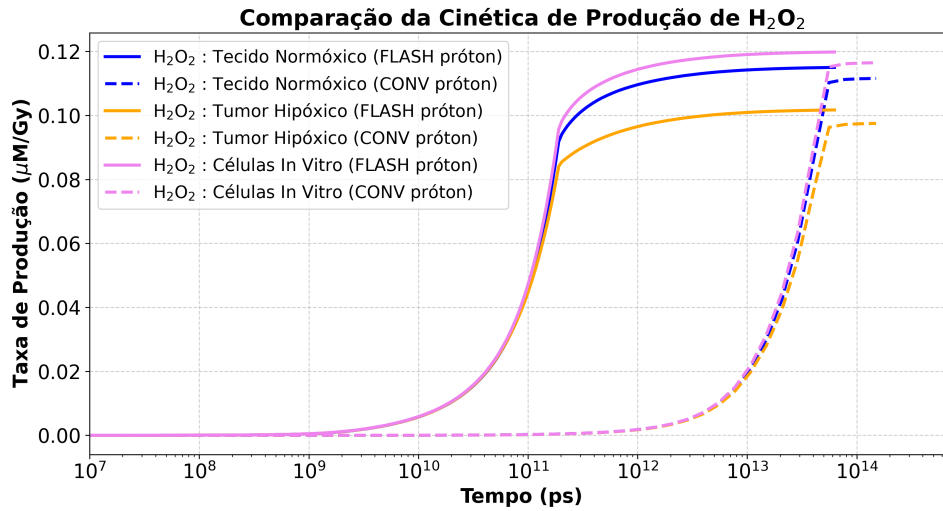


Figura 4.12: Comparação dos resultados de produção de H_2O_2 entre os três diferentes níveis de oxigenação e as diferentes taxas de dose para o feixe de prótons.



5 DISCUSSÕES

De acordo com as Figuras 4.7 e 4.8, o maior pico de consumo de O_2 ocorreu na situação de células *in vitro* para os elétrons FLASH ($0,0658 \mu M/Gy$) e CONV ($0,0095 \mu M/Gy$) e para os prótons FLASH ($0,0470 \mu M/Gy$) e CONV ($0,0070 \mu M/Gy$). Dessa forma, percebe-se que o maior consumo de O_2 ocorre nos ambientes com maior concentração de O_2 .

Além disso, essas figuras mostraram que as diferenças entre o pico de consumo de O_2 do ambiente *in vitro* e o do ambiente normóxico, e entre o pico de consumo de O_2 do ambiente normóxico e o do ambiente hipóxico parecem obedecer a uma proporção na FLASH e na CONV para cada tipo de ambiente e feixe. Foram calculadas as razões aproximadas *in vitro*-normóxico, normóxico-hipóxico e *in vitro*-hipóxico dos valores de pico de consumo de O_2 e organizadas na Tabela 5.1.

Tabela 5.1: Razões aproximadas *in vitro*-normóxico, normóxico-hipóxico e *in vitro*-hipóxico dos valores de pico de consumo de O_2 apresentados nas Figuras 4.7a e 4.8a.

	<i>in vitro</i> /normóxico	normóxico/hipóxico	<i>in vitro</i> /hipóxico
FLASH e^-	1,039	1,313	1,365
FLASH prótons	1,037	1,313	1,362
CONV e^-	1,033	1,082	1,118
CONV prótons	1,029	1,097	1,129

Com base nos dados da Tabela 5.1, percebe-se claramente que uma proporção nas curvas de consumo de O_2 é seguida na modalidade FLASH (prótons e e^-) e na modalidade CONV (prótons e e^-) para uma mesma relação entre os níveis de oxigenação. Por exemplo, a razão *in vitro*-normóxico para FLASH e^- é igual a 1,039 e para FLASH prótons é igual a 1,037.

Os dados mostraram precisão significativa. As razões que mais se distanciaram foram os valores de normóxico-hipóxico para CONV e^- e CONV prótons, com uma diferença de 0,015, correspondente a um aumento de 1,39% em relação a 1,082.

De acordo com os gráficos das Figuras 4.7 e 4.8, os valores de pico em cada um dos ambientes com a modalidade FLASH parecem ser cerca de uma ordem de grandeza maiores do que os valores de pico com a modalidade CONV. Foram calculadas as variações percentuais $r = (\text{pico FLASH/pico CONV} - 1) \cdot 100\%$ para cada concentração de oxigênio e os dados obtidos foram organizados na Tabela 5.2. Quanto maior o valor de r , maior a diferença entre o pico de consumo de O_2 da modalidade FLASH e o da CONV.

Tabela 5.2: Razões aproximadas $r = (\text{pico FLASH/pico CONV} - 1) \cdot 100\%$ com os valores de pico obtidos em cada uma das três concentrações de oxigênio das Figuras 4.7a e 4.8a: $5\mu\text{M}$ (tumor hipóxico), $40\mu\text{M}$ (tecido normóxico) e $250\mu\text{M}$ (células *in vitro*).

r	FLASH vs CONV e^-	FLASH vs CONV próton
$5\mu\text{M}$	467,06%	456,45%
$40\mu\text{M}$	588,04%	566,18%
$250\mu\text{M}$	592,63%	571,43%

A diferença entre os picos de consumo dos tecidos normóxico e hipóxico para o feixe de prótons foi de $0,0006\mu\text{M/Gy}$ (CONV-RT) e $0,0108\mu\text{M/Gy}$ (FLASH-RT). Para o feixe de elétrons foi de $0,0007\mu\text{M/Gy}$ (CONV-RT) e $0,0151\mu\text{M/Gy}$ (FLASH-RT). Nesse sentido, a partir dos dados da Tabela 5.2, notou-se que os valores de pico na modalidade FLASH são em média 540,29% maiores (média aritmética de todos os valores de r) do que os valores de pico na CONV. A maior implicação desse fato é a hipóxia transitória causada pelas taxas de dose ultra-altas, que constitui a observação do principal objetivo deste trabalho. É imperioso destacar que, quanto maior o consumo de O_2 , menor a quantidade de radicais livres e a fixação de danos ao DNA. Ademais, essa diferença também pode ser percebida qualitativamente por meio das Figuras 4.7 e 4.8.

Sobre a comparação entre os picos de consumo de O_2 em função dos níveis de oxigenação nos gráficos das Figuras 4.9 e 4.10, assumiram-se retas entre os pontos de concentração 5 e $40\mu\text{M}$ e entre 40 e $250\mu\text{M}$ para analisar a variação dos valores de pico de consumo de O_2 com o aumento da concentração de O_2 em cada ambiente. Então, foram calculados os coeficientes angulares das quatro retas do gráfico de comparação do consumo de O_2 entre CONV e^- e CONV próton (direita) e das quatro retas do gráfico da comparação de consumo de O_2 entre FLASH e^- e FLASH próton (esquerda). Os coeficientes angulares servem como uma ferramenta para avaliar o quanto deveria ser o crescimento do valor de pico numa concentração de O_2 maior caso esse comportamento fosse linear. Essa análise permitiu entender se a relação entre a concentração de O_2 e o valor de consumo de O_2 enfraquece ou não com o aumento da concentração de O_2 do meio. Ademais, foram calculadas as razões entre os coeficientes angulares das retas de uma mesma região. As retas foram separadas em duas regiões: 5-40 μM (1)

e 40-250 μM (2). Os dados foram organizados nas Tabelas 5.3, 5.4 e 5.5.

Tabela 5.3: Coeficientes angulares α das retas das regiões 1 (5-40 μM) e 2 (40-250 μM) referentes ao gráfico da comparação de consumo de O_2 entre os feixes de próton e elétron para o regime CONV (imagem da direita da Figura 4.9).

Retas CONV	Coeficiente angular α ($\times 10^{-6}$)
Região 1 e^-	20,0
Região 2 e^-	1,4
Região 1 próton	17,1
Região 2 próton	0,9

Tabela 5.4: Coeficientes angulares α das retas das regiões 1 (5-40 μM) e 2 (40-250 μM) referentes ao gráfico da comparação de consumo de O_2 entre os feixes de próton e elétron para o regime FLASH (imagem da esquerda da Figura 4.9).

Retas FLASH	Coeficiente angular α ($\times 10^{-6}$)
Região 1 e^-	431,4
Região 2 e^-	11,9
Região 1 próton	308,6
Região 2 próton	8,1

Tabela 5.5: Razão dos coeficientes angulares das semirretas que compartilham um mesmo ponto referentes aos gráficos da comparação de consumo de O_2 entre os feixes de próton e elétron para os regimes FLASH e CONV da Figura 4.9. A razão α_2/α_1 refere-se ao feixe de elétrons e a razão α_4/α_3 refere-se ao feixe de prótons.

	α_2/α_1	α_4/α_3
Semirretas CONV	7,0%	5,3%
Semirretas FLASH	2,8%	2,6%

Segundo as Tabelas 5.3, 5.4 e 5.5, o coeficiente angular das retas CONV que ligam os pontos de concentração de O_2 de 40 a 250 μM foi 93% menor para o feixe de e^- e 94,7% menor para o feixe de prótons em relação ao das retas que ligam os pontos da região 1. O coeficiente angular das retas FLASH que ligam os pontos de concentração de O_2 de 40 a 250 μM foi 97,2% menor para o feixe de e^- e 97,4% menor para o feixe de prótons em relação ao das retas que ligam os pontos da região 1. Portanto, conclui-se que para valores de concentração de O_2 maiores do que 40 μM , o nível de oxigenação do meio passa a ter uma influência extremamente reduzida sobre o consumo de O_2 .

Nas Figuras 4.1, 4.2, 4.3, 4.4, 4.5, 4.6, 4.7a e 4.8a, a curva de consumo de O_2 da modalidade FLASH sobe rapidamente devido à alta taxa de dose, mas cai repentinamente. Isso

acontece, pois a cinética das reações que consomem O_2 diminui ao mesmo tempo que ocorre a reoxigenação do meio. Caso a simulação das reações biológicas fosse realizada, esperava-se que, após esse pico, o consumo de O_2 caísse lentamente, a prolongar o período de hipóxia transitória.

Tabela 5.6: Razão dos picos de consumo de O_2 de e^- pelos picos de prótons nas modalidades FLASH e CONV para três valores de concentração de oxigênio: $5\mu M$ (tumor hipóxico), $40\mu M$ (tecido normóxico) e $250\mu M$ (células *in vitro*).

	FLASH e^- /próton	CONV e^- /próton
$5\mu M$	1,397	1,371
$40\mu M$	1,397	1,353
$250\mu M$	1,400	1,357

Os gráficos da Figura 4.9 e os dados da Tabela 5.6 mostram que houve um consumo em média 1,398 vezes maior na modalidade FLASH com elétrons do que com prótons nos três níveis de oxigenação. Acredita-se que tal efeito diferencial entre os tipos de feixe seja devido aos diferentes modelos de física utilizados para gerar o espaço de fase de cada tipo de feixe, visto que essa diferença não foi investigada. O consumo na modalidade CONV também foi em média 1,360 vezes maior para o feixe de elétrons do que para o de prótons. Além disso, os valores dos coeficientes angulares α das retas FLASH, segundo as Tabelas 5.3 e 5.4, foram em média 2,77% maiores do que os das retas CONV correspondentes.

Para analisar a diferença na produção de H_2O_2 entre os feixes de elétrons e prótons, foi calculada a variação percentual ν dos valores finais das curvas de produção de H_2O_2 das Figuras 4.11 e 4.12 entre ambos os tipos de feixes em cada modalidade nos três diferentes ambientes. Os dados foram organizados na Tabela 5.7. Percebeu-se que, exceto para FLASH em tumor hipóxico, os valores finais das curvas de produção de H_2O_2 para o feixe de prótons foram em média 7,28% maiores (média aritmética de todos os valores de ν) do que para o feixe de elétrons.

Tabela 5.7: Variação percentual ν dos valores finais das curvas de produção de H_2O_2 entre o feixe de prótons e o feixe de elétrons para cada modalidade em três diferentes concentrações de O_2 : $5\mu M$ (tumor hipóxico), $40\mu M$ (tecido normóxico) e $250\mu M$ (células *in vitro*).

ν	(FLASH próton/FLASH e^- - 1) · 100%	(CONV próton/CONV e^- - 1) · 100%
$5\mu M$	0%	8,89%
$40\mu M$	3,60%	13,13%
$250\mu M$	4,35%	13,73%

Semelhantemente ao comportamento de diferenciação de consumo de O_2 entre os diferentes níveis de oxigenação para uma mesma modalidade, a cinética de produção de H_2O_2 (Figuras 4.11 e 4.12) foi maior nos ambientes mais oxigenados e a diferenciação entre os níveis de oxigenação parece também ser proporcional, tanto para a modalidade FLASH quanto para

a CONV. Para análise da proporcionalidade, foi calculada a variação percentual t dos valores finais das curvas de produção de H_2O_2 dos gráficos das Figuras 4.11 e 4.12 e os dados obtidos foram organizados na Tabela 5.8.

Tabela 5.8: Variação percentual $t = (\text{ambiente}_1/\text{ambiente}_2 - 1) \cdot 100\%$ dos valores finais das curvas de produção de H_2O_2 entre os ambientes de diferentes concentrações de O_2 para ambas as modalidades (FLASH e CONV) e ambos os tipos de feixes (de elétrons e de prótons). São três ambientes: $5\mu M$ (tumor hipóxico), $40\mu M$ (tecido normóxico) e $250\mu M$ (células *in vitro*).

t	<i>in vitro</i> -normóxico	normóxico-hipóxico	<i>in vitro</i> -hipóxico
FLASH e^-	3,60%	8,82%	12,75%
CONV e^-	3,03%	10,00%	13,33%
FLASH próton	4,35%	12,75%	17,65%
CONV próton	3,57%	14,29%	18,37%

De acordo com os dados da Tabela 5.7, a produção de H_2O_2 em cada um dos três ambientes foi maior para o feixe de prótons e menor para o de elétrons, exceto na comparação entre FLASH próton e FLASH e^- em ambiente hipóxico, na qual os valores foram iguais. A mesma comparação entre FLASH e CONV, cujos dados foram apresentados na Tabela 5.8, mostrou que uma proporção entre FLASH e^- e CONV e^- e entre FLASH próton e CONV próton é seguida em cada um dos três ambientes. É importante salientar que o tempo de simulação da CONV é diferente do da FLASH. Esse é um fator que limitou a precisão da comparação e explica a leve diferença das variações percentuais entre FLASH e CONV para cada tipo de feixe.

É importante lembrar que o H_2O_2 é uma espécie química altamente oxidante e prejudicial às células. Com base nos dados apresentados nas Figuras 4.11 e 4.12, foi observado que houve maior produção de peróxido de hidrogênio nos ambientes com maiores concentrações de O_2 em ambas as modalidades. Nesse sentido, sugere-se que o efeito protetor da FLASH-RT seja explicado da seguinte maneira: há uma maior produção de H_2O_2 no ambiente de tumor hipóxico na FLASH do que na CONV e, apesar de a quantidade de H_2O_2 ser também maior no ambiente normóxico na FLASH do que na CONV, no ambiente normóxico, ocorre um imenso consumo de O_2 , causando uma hipóxia transitória. Portanto, o ambiente normóxico, apesar de apresentar maiores níveis de H_2O_2 , é protegido pela hipóxia transitória, que não ocorre no ambiente hipóxico. Essa hipótese foi elaborada com base nos dados, apesar de não serem capazes de comprová-la.

6 CONCLUSÃO

Com base nos resultados e nas análises dos valores obtidos nas simulações, conclui-se, primeiramente, que a hipóxia transitória ocorre e a hipótese do mecanismo de ação do efeito FLASH é apoiada pelos resultados deste trabalho, apesar de os efeitos biológicos não terem

sido simulados. Além disso, percebeu-se que o consumo de O_2 é sempre maior nos tecidos de maior concentração de O_2 , mas também que essa relação enfraquece drasticamente (redução de mais de 90%) a partir de uma concentração de $40 \mu M$. A comparação do consumo de O_2 para a CONV e^- e para a CONV próton mostrou obedecer a uma proporção entre os três ambientes irradiados. O mesmo ocorreu para o FLASH e^- e o FLASH próton.

Foi observado que os valores de pico de consumo de O_2 na modalidade FLASH são mais dependentes da concentração de O_2 do meio do que na modalidade CONV. Ademais, foi observada uma diferenciação no consumo de O_2 entre os feixes de elétrons e prótons em ambas as modalidades, o que possivelmente decorre da escolha dos modelos de física utilizados nas simulações. Finalmente, por meio de uma análise qualitativa, percebeu-se um comportamento de proporcionalidade na cinética de produção de H_2O_2 entre FLASH e CONV, o qual foi posteriormente confirmado quantitativamente, bem como uma similaridade na produção de H_2O_2 entre a CONV e a FLASH.

Referências

- [1] Roberto de Andrade Martins. A descoberta dos raios x:"o primeiro comunicado de röntgen". *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 20, 1998.
- [2] Universidade Federal do Rio Grande do Sul. A descoberta da radioatividade. Disponível em: https://www.if.ufrgs.br/tex/fis142/fismod/mod06/m_s02.html. Acessado em: 28 de abril de 2026.
- [3] Sociedade Brasileira de Radioterapia. História da radioterapia. Disponível em: <https://sbradioterapia.com.br/pacientes-e-leigos/historia-da-radioterapia/historia-da-radioterapia/>. Acessado em: 28 de abril de 2026.
- [4] Marcus Vinicius Teixeira Navarro, Handerson Jorge Dourado Leite, Josemir da Cruz Alexandrino, and Ediná Alves Costa. Controle de riscos à saúde em radiodiagnóstico: uma perspectiva histórica. *História, Ciências, Saúde-Manguinhos*, 15(4):1039–1047, 2008.
- [5] Nima Ghaderi, Joseph Jung, Sarah C Brüningk, Ajay Subramanian, Lauren Nassour, and Jeffrey Peacock. *A century of fractionated radiotherapy: how mathematical oncology can break the rules*. *International journal of molecular sciences*, 23(3):1316, 2022.
- [6] Anderson Sorgatti de Souza. Estudo comparativo dos parâmetros associados à dose absorvida e controle de qualidade em aceleradores lineares com filtro aplainador (ff) e sem filtro aplainador (fff). *SÃO PAULO: Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo*, 2017.
- [7] Radiation Oncology Systems. *Varian High Energy Linear Accelerator Comparison Chart*. Disponível em: <https://www.oncologysystems.com/resources/linear-accelerator-guides/varian-high-energy-linear-accelerators-comparison-chart/>. Acessado em: 15 de junho de 2026.
- [8] Vincent Favaudon, Laura Caplier, Virginie Monceau, Frédéric Pouzoulet, Mano Sayarath, Charles Fouillade, Marie-France Poupon, Isabel Brito, Philippe Hupé, Jean Bourhis, et al. *Ultrahigh dose-rate FLASH irradiation increases the differential response between normal and tumor tissue in mice*. *Science translational medicine*, 6(245):245ra93–245ra93, 2014.
- [9] Emico Okuno e Elisabeth Yoshimura. *Física das Radicações*. Oficina de Textos, 2010.
- [10] Luiz Alberto Malaguti Scaff. *Física da Radioterapia*. Sarvier, 1997.
- [11] Fredrik Kalholm, Leszek Grzanka, Erik Traneus, and Niels Bassler. *A systematic review on the usage of averaged LET in radiation biology for particle therapy*. *Radiotherapy and Oncology*, 161:211–221, 2021.

- [12] RC Castro. Cálculo de dose equivalente em órgãos de pacientes devido a fotonêutrons gerados em aceleradores lineares clínicos. *RIO DE JANEIRO: Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE*, 2005.
- [13] Helena Regina Comodo Segreto. *Radiobiologia: Da Bancada à Clínica*. Scortecci, 2024.
- [14] Diogo Carvalho Guerra Liberal. Avaliação e caracterização por métodos computacionais de diferentes radioisótopos no contexto da terapia paliativa de metástases ósseas. Master's thesis, Universidade do Porto (Portugal), 2014.
- [15] Fausto Mafra Neto e Érico Luiz Martins Reis. Teleterapia de alta energia riscos para pacientes e operadores. Disponível em: <http://www.radioterapiamineira.org/teleterapia-de-alta-energia-riscos>. Acessado em: 8 de junho de 2026.
- [16] IAEA Ervin B. Podgorsak. *Radiation Oncology Physics: A Handbook for Teachers and Students*. IAEA (International Atomic Energy Agency), 2005.
- [17] DL Dewey and JW Boag. *Modification of the oxygen effect when bacteria are given large pulses of radiation*. *Nature*, 183(4673):1450–1451, 1959.
- [18] Binwei Lin, Feng Gao, Yiwei Yang, Dai Wu, Yu Zhang, Gang Feng, Tangzhi Dai, and Xiaobo Du. *FLASH radiotherapy: history and future*. *Frontiers in oncology*, 11:644400, 2021.
- [19] Jean Bourhis, Wendy Jeanneret Sozzi, Patrik Gonçalves Jorge, Olivier Gaide, Claude Bailat, Frédéric Duclos, David Patin, Mahmut Ozsahin, François Bochud, Jean-François Germond, et al. *Treatment of a first patient with FLASH-radiotherapy*. *Radiotherapy and oncology*, 139:18–22, 2019.
- [20] Yupeng Di, Lingling Meng, Yingjie Wang, and Jing Li. *Advances in FLASH radiation therapy: A review on biological foundations and clinical prospects*. *Translational Oncology*, 65:102676, 2026.
- [21] Samriddhi Shukla, Taniya Saha, Nihar Rama, Anusha Acharya, Tien Le, Fenghua Bian, Johnny Donovan, Lin Abigail Tan, Ralph Vatner, Vladimir Kalinichenko, et al. *Ultra-high dose-rate proton FLASH improves tumor control*. *Radiotherapy and Oncology*, 186:109741, 2023.
- [22] Carlo Rossi, Jean-Marc Cravero, Terence Garvey, Walter Wuensch, Olivier Brunner, Sébastien Curtoni, Jeremie Bauche, Vera Korchevnyuk, Maria Elena Angoletta, Alexej Grudiev, et al. *JACOW: The Deep Electron FLASH Therapy facility*. *JACoW LINAC*, 2024:WEYA002, 2024.

- [23] Jérôme Faure, Yannick Glinec, A Pukhov, S Kiselev, S Gordienko, E Lefebvre, J-P Rousseau, F Burgy, and Victor Malka. *A laser-plasma accelerator producing monoenergetic electron beams*. *Nature*, 431(7008):541–544, 2004.
- [24] Luca Labate, Daniele Palla, Daniele Panetta, Federico Avella, Federica Baffigi, Fernando Brandi, Fabio Di Martino, Lorenzo Fulgentini, Antonio Giulietti, Petra Köster, et al. *Toward an effective use of laser-driven very high energy electrons for radiotherapy: Feasibility assessment of multi-field and intensity modulation irradiation schemes*. *Scientific reports*, 10(1):17307, 2020.
- [25] Peter G Maxim, Sami G Tantawi, and Billy W Loo Jr. *PHASER: A platform for clinical translation of FLASH cancer radiotherapy*. *Radiotherapy and Oncology*, 139:28–33, 2019.
- [26] Marie-Catherine Vozenin, Jean Bourhis, and Marco Durante. *Towards clinical translation of FLASH radiotherapy*. *Nature Reviews Clinical Oncology*, 19(12):791–803, 2022.
- [27] Andrea Borghini, Luca Labate, Simona Piccinini, Costanza Maria Vittoria Panaino, Maria Grazia Andreassi, and Leonida Antonio Gizzi. *FLASH radiotherapy: expectations, challenges, and current knowledge*. *International Journal of Molecular Sciences*, 25(5):2546, 2024.
- [28] Malvin H. Kalos e Paula A. Whitlock. *Monte Carlo Methods*. Wiley-VCH, 2008.
- [29] Joseph D Wilson, Ester M Hammond, Geoff S Higgins, and Kristoffer Petersson. Ultra-high dose rate (flash) radiotherapy: Silver bullet or fool’s gold? *Frontiers in oncology*, 9:1563, 2020.
- [30] J Naoki D-Kondo, Omar R Garcia-Garcia, Jay A LaVerne, Bruce Faddegon, Jan Schuemann, Wook-Geun Shin, and José Ramos-Méndez. *An integrated Monte Carlo track-structure simulation framework for modeling inter and intra-track effects on homogenous chemistry*. *Physics in Medicine & Biology*, 68(12):125008, 2023.
- [31] Qixian Zhang, Leo E Gerweck, Ethan Cascio, Qingyuan Yang, Peigen Huang, Andrzej Niemierko, Alejandro Bertolet, Konrad Pawel Nesteruk, Aimee McNamara, and Jan Schuemann. *Proton FLASH effects on mouse skin at different oxygen tensions*. *Physics in Medicine & Biology*, 68(5):055010, 2023.



GATOS INSTÁVEIS

Nanopartículas de BaSO_4Tb para terapia fotodinâmica
ativada por raios X: avaliação do potencial como
nanocintiladores

Iara Paulone Gonçalves

Orientador: Prof. Dr. Éder José Guidelli

Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da

Universidade de São Paulo

2026



Instituto Principia

Universidade de São Paulo - USP

**Nanopartículas de BaSO₄:Tb para Terapia Fotodinâmica
Ativada por Raios X: avaliação do potencial como
nanocintiladores**

Iara Paulone Gonçalves

Orientador: Prof. Dr. Éder José Guidelli

Coorientador: João Victor Vieira Lessa

São Paulo, 2026

AGRADECIMENTOS

Este trabalho representa não apenas o resultado de um projeto de pesquisa, mas também o apoio, a confiança e a dedicação de muitas pessoas que estiveram ao meu lado ao longo dessa trajetória.

Primeiramente, gostaria de agradecer ao meu pai, Ricardo, e à minha mãe, Gisele, por todo o apoio que me ofereceram desde o momento em que comentei a ideia de participar do processo seletivo da Escola de Talentos. O incentivo e o suporte que vocês me deram foram essenciais para que eu pudesse me dedicar ao projeto e acreditar que era capaz de fazer parte dessa iniciativa tão especial e desafiadora.

Não tenho palavras para expressar o quanto sou grata pela oportunidade de integrar a Escola de Talentos, proporcionada pelo Instituto Principia. A experiência de participar e concluir esse projeto, de ter contato com pesquisadores referência em suas áreas e de desenvolver um trabalho como este ainda durante o ensino médio é algo verdadeiramente indescritível. Gostaria também de destacar a importância do trabalho de todos os funcionários do Instituto Principia, que tornaram possíveis as aulas, os encontros e todas as atividades da Escola de Talentos, além de oferecerem suporte constante aos alunos desde as primeiras reuniões.

Em especial, agradeço ao Prof. Dr. Ricardo D'Elia Matheus, tutor e diretor da Escola de Talentos; ao Prof. Dr. Marcelo Guzzo, presidente do Grupo de Patronos; ao Sr. Welington Barbosa, coordenador e secretário da Escola de Talentos; e aos Profs. Drs. André Paschoal e Leonardo de Lima, tutores do programa. Nunca me esquecerei de todo o conhecimento, das aulas e do auxílio que vocês me proporcionaram. Suas orientações foram essenciais para minha formação acadêmica ao longo desse percurso, e a atenção, a compreensão e o apoio constantes me ajudaram a superar obstáculos e enfrentar os desafios cotidianos com mais segurança e tranquilidade.

Não poderia deixar de mencionar as incríveis amizades construídas durante essa caminhada. Fazer parte da turma “Gatos Instáveis” tornou essa experiência ainda mais especial. Meus colegas de turma, bem como estudantes de outros anos, veteranos e ingressantes, foram fundamentais nessa trajetória. Não sei se conseguiria ter chegado até aqui sem o apoio, as conversas, os desabafos, os momentos de desespero e também os de intensa felicidade que compartilhamos. Levarei cada um de vocês com muito carinho em minha memória.

Por fim, agradeço imensamente ao meu orientador, Prof. Dr. Éder José Guidelli, e ao meu coorientador, João Vitor Vieira Lessa. Sou profundamente grata por terem me guiado durante o desenvolvimento deste projeto, pela oportunidade de conhecer o Departamento de Física da Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo (FFCLRP-USP) e o laboratório Nanodose, bem como pelo tempo, conhecimento e orientações que compartilharam comigo. Concluir este trabalho é motivo de grande emoção, e saber que pude contar com o apoio de pesquisadores tão dedicados e inspiradores como vocês é um verdadeiro privilégio!

RESUMO

O presente trabalho teve como objetivo analisar a viabilidade da utilização de nanopartículas cintiladoras de sulfato de bário dopado com térbio ($\text{BaSO}_4\text{:Tb}$) na Terapia Fotodinâmica Ativada por Raios X (X-PDT). Para isso, as nanopartículas foram sintetizadas e caracterizadas quanto à sua morfologia e distribuição de tamanhos. Além disso, foram realizadas medidas de radioluminescência na presença e na ausência do fotossensibilizador Rosa Bengala, análises do espectro de absorção do fotossensibilizador e avaliações da produção de espécies reativas de oxigênio. Os resultados mostraram que as nanopartículas apresentaram morfologia poliédrica, tamanho médio de $34 \pm 8 \text{ nm}$, com certa polidispersidade. Observou-se ainda a sobreposição entre a banda de absorção da Rosa Bengala e a emissão de radioluminescência das nanopartículas, resultando em uma eficiência de transferência de energia de 86%. Adicionalmente, verificou-se a formação de oxigênio singlete, importante espécie reativa associada ao mecanismo da terapia fotodinâmica. Conclui-se que as nanopartículas de $\text{BaSO}_4\text{:Tb}$ constituem candidatas promissoras para aplicações em X-PDT, sendo necessários estudos futuros para avaliar sua eficácia e segurança em sistemas biológicos.

ABSTRACT

This work had as its main goal the analysis of the viability of using terbium-doped barium sulfate scintillating nanoparticles ($\text{BaSO}_4\text{:Tb}$) in X-ray-activated photodynamic therapy (X-PDT). To achieve this goal, the nanoparticles were synthesized and characterized according to their morphology and size distribution. Furthermore, radioluminescence in the presence and absence of the photosensitizer Rose Bengal, as well as the production of reactive oxygen species, were also analyzed. Our results showed that the nanoparticles had a mean size of $34 \pm 8 \text{ nm}$, with some degree of polydispersity. An overlap between the absorption band of Rose Bengal and the radioluminescence emission of the nanoparticles was also observed, resulting in an energy transfer efficiency of 86%. Additionally, the formation of singlet oxygen, an important reactive oxygen species involved in the mechanism of photodynamic therapy, was confirmed. These findings indicate that $\text{BaSO}_4\text{:Tb}$ nanoparticles are promising candidates for applications in X-ray-activated photodynamic therapy (X-PDT). However, further studies are required to evaluate their efficacy and safety in biological systems.

SUMÁRIO

1. Introdução	8
2. Objetivo.....	10
3. Fundamentação Teórica.....	11
3.1 A nanotecnologia.....	11
3.2 Técnicas de nanocaracterização.....	14
3.3 Fotossensibilizador.....	15
3.4 Cintiladores	16
3.5 Diagrama de Jablonski.....	17
3.6 Interação entre raios X e materiais	18
4. Materiais e Métodos.....	19
4.1 Síntese das NPs de BaSO ₄ :Tb e recobrimento com o fotossensibilizador	19
4.2 Caracterização morfológica e estrutural das NPs	19
4.3 Determinação dos espectros de emissão das NPs de BaSO ₄ :Tb	19
4.4 Medição da absorbância do fotossensibilizador Rosa Bengala (RB).....	20
4.5 Mensuração dos espectros de emissão das NPs de BaSO ₄ :Tb@RB	20
4.6 Avaliação da produção de espécies reativas de oxigênio (ROS).....	20
5. Resultados e discussão.....	21
5.1 Tamanho e morfologia	21
5.2 Absorbância da RB e RL das ScNPs.....	22
5.3 RL das NPs de BaSO ₄ :Tb@RB (funcionalizadas).....	24
5.4 Geração de espécie reativas de oxigênio (ROS) em soluções.....	25
6. Conclusão.....	28
7.Referências.....	29

1. Introdução

Câncer é o nome dado a um grupo de mais de 200 doenças caracterizadas pelo crescimento desordenado de células. Ele ocorre quando o DNA celular sofre alterações (mutações), levando essas células a se multiplicarem de forma acelerada, a ignorarem os sinais de morte celular programada e a invadirem tecidos e órgãos saudáveis.

Os índices relacionados a essa doença são alarmantes nos dias atuais: estima-se que uma em cada cinco pessoas ao redor do mundo desenvolverá câncer ao longo da vida. O alerta é da International Agency for Research on Cancer (IARC), entidade vinculada à Organização Mundial da Saúde (OMS). Além disso, a OMS informou que a incidência de novos casos de câncer no mundo deverá passar de 20 milhões em 2022 para 35,3 milhões em 2050, representando um aumento de 77%. A prevenção da doença representa um dos maiores desafios da saúde pública global. Diante desse cenário, investimentos e pesquisas voltados ao tratamento do câncer têm se intensificado em escala mundial.

Os raios X são o elemento chave para o desenvolvimento de exames de imagem, análise de materiais e tratamentos médicos. Sua principal aplicação no tratamento de câncer, a radioterapia (RT), consiste no uso dessa radiação para promover danos nos tecidos tumorais, culminando na morte destes tecidos. Embora os raios X possam danificar fatalmente as células tumorais, eles também apresentam toxicidade para o tecido normal. Portanto, é muito importante encontrar um equilíbrio entre inibir o crescimento do tumor e reduzir os efeitos colaterais no tecido normal, controlando a dose de radiação administrada aos pacientes.

Outra opção de tratamento existente nos dias atuais é a Terapia Fotodinâmica (PDT), que consiste no uso de fotossensibilizadores, que serão ativados por luz de um comprimento de onda apropriado (geralmente entre 400 *nm* a 800 *nm*), para emitir energia, produzindo espécies reativas de oxigênio (ROS) citotóxicas, que culminarão na morte celular (apoptose).

Em comparação com a radioterapia, a terapia fotodinâmica apresenta-se como uma alternativa menos invasiva, com menores efeitos colaterais e menores danos aos tecidos saudáveis. Entretanto, a luz utilizada na PDT penetra consideravelmente menos no organismo, representando a principal limitação dessa terapia, fazendo com que seu uso seja possível apenas para tratamento de tumores mais superficiais.

Nas últimas décadas, o desenvolvimento da nanotecnologia permitiu que se estudasse mais a fundo o comportamento de cintiladores e suas aplicações. Uma delas gerou a Terapia Fotodinâmica Ativada por Raios X (X-PDT), técnica que consiste em uma união dos mecanismos utilizados na radioterapia e na terapia fotodinâmica convencional, usando raios X, que possuem maior poder de penetração que a luz visível, para excitar os nanocintiladores, dando início ao processo que ocorre na PDT.

Desse modo, a X-PDT apresenta-se como uma alternativa promissora por intensificar e concentrar o tratamento em locais específicos do organismo, diminuindo os efeitos colaterais causados pela interação da radiação com os tecidos saudáveis e permitindo o tratamento em tumores mais profundos.

2. Objetivo

Atualmente, diversas combinações entre materiais cintiladores e fotossensibilizadores têm sido investigadas visando ao desenvolvimento de sistemas para terapia fotodinâmica ativada por raios X (X-PDT) com baixa toxicidade, elevada eficiência de conversão de energia e maior eficácia terapêutica. Nesse contexto, este trabalho teve como objetivo avaliar a viabilidade da utilização de nanopartículas cintiladoras de sulfato de bário dopado com térbio ($\text{BaSO}_4\text{:Tb}$) como cintiladores para X-PDT. Para isso, foram avaliadas a interação entre as nanopartículas e o fotossensibilizador Rosa Bengala, a eficiência da transferência de energia e a capacidade do sistema em gerar oxigênio singlete sob irradiação por raios X.

3. Fundamentação Teórica

3.1 A nanotecnologia

A nanociência constitui o ramo da ciência dedicado ao estudo dos fenômenos, das propriedades e das estruturas em escala nanométrica. A partir desse conhecimento, surge a nanotecnologia, que corresponde à aplicação prática desses princípios por meio da manipulação de átomos e moléculas para o desenvolvimento de materiais, dispositivos e sistemas com propriedades físico-químicas inovadoras, muitas vezes distintas daquelas observadas em escala macroscópica.

3.1.1 Contexto histórico

Quando nos referimos à história da nanotecnologia, um dos nomes mais citados é o do físico Richard Feynman, ganhador do prêmio Nobel de 1958. Isto ocorre em decorrência de uma famosa palestra ministrada pelo físico durante o encontro da Sociedade Americana de Física, em dezembro de 1959, na qual sugeriu que não haveria limites físicos para, por exemplo, se escrever na cabeça de um alfinete, sugerindo que “havia muito espaço lá embaixo”, frase que relaciona-se com o título de sua palestra: “There’s plenty of room at the bottom”, expondo assim suas percepções sobre o assunto. É importante ressaltar que Feynman não foi o primeiro a pensar sobre essa possibilidade, mas contribuiu fortemente para a difusão dessa ideia. [1]

O termo “nanotecnologia” aparece pela primeira vez em artigo intitulado “On the Basic Concept of „Nanotechnology”” (O conceito básico de Nanotecnologia), publicado pelo professor Norio Taniguchi, em 1974. [1]

Considerando-se os processos químicos, físicos e biológicos que ocorrem na natureza, é possível identificar a presença da nanotecnologia em períodos remotos da história da humanidade. Há aproximadamente 4000 anos A.C., os alquimistas egípcios utilizavam o “elixir de ouro” para estimular a mente e restaurar a juventude. O famoso “elixir” da longa vida, era constituído na realidade por partículas de ouro em suspensão com tamanho da ordem de 1-100nm. Além disso, misturas do tipo nanopartícula e vidro, eram utilizadas na Europa para colorir os vitrais das igrejas medievais, sendo o ouro a nanopartícula comumente utilizada [2].

Embora a manipulação da matéria em escalas atômica e nanométrica já fosse algo possível e realizado, sua comprovação por meio de experimentos práticos ainda dependia do avanço de técnicas avançadas de microscopia. Em 1981, houve a invenção do microscópio de tunelamento por varredura (STM, do inglês

scanning tunneling microscope) pelos cientistas Gerd Binnig e Heinrich Rohrer na IBM. A descoberta permitiu o imageamento bidimensional de superfícies condutoras com resolução atômica, e ambos os pesquisadores foram agraciados com o prêmio Nobel de Física em 1986 pela importante descoberta. Alguns anos depois, Binnig e colaboradores desenvolveram o microscópio de força atômica (AFM, do inglês “atomic force microscope”), que não demanda utilização de corrente elétrica no imageamento e possibilita varrer qualquer tipo de superfície, fosse ela condutora elétrica ou não.

Desde então, muito se tem avançado no desenvolvimento de técnicas e tecnologias empregadas na formação e caracterização de diversos tipos de nanoestruturas, bem como em investigações sobre muitas de suas interessantes propriedades e potenciais aplicações.

3.1.2 A escala nano

O prefixo “nano” vem do grego “nánnos” (anão) e pode ser utilizado em conjunto com qualquer unidade de medida, significando um bilionésimo dessa unidade. Assim, um nanômetro equivale a um bilionésimo de um metro (10^{-9} m); um nanossegundo equivale a um bilionésimo de um segundo (10^{-9} s), e assim por diante.

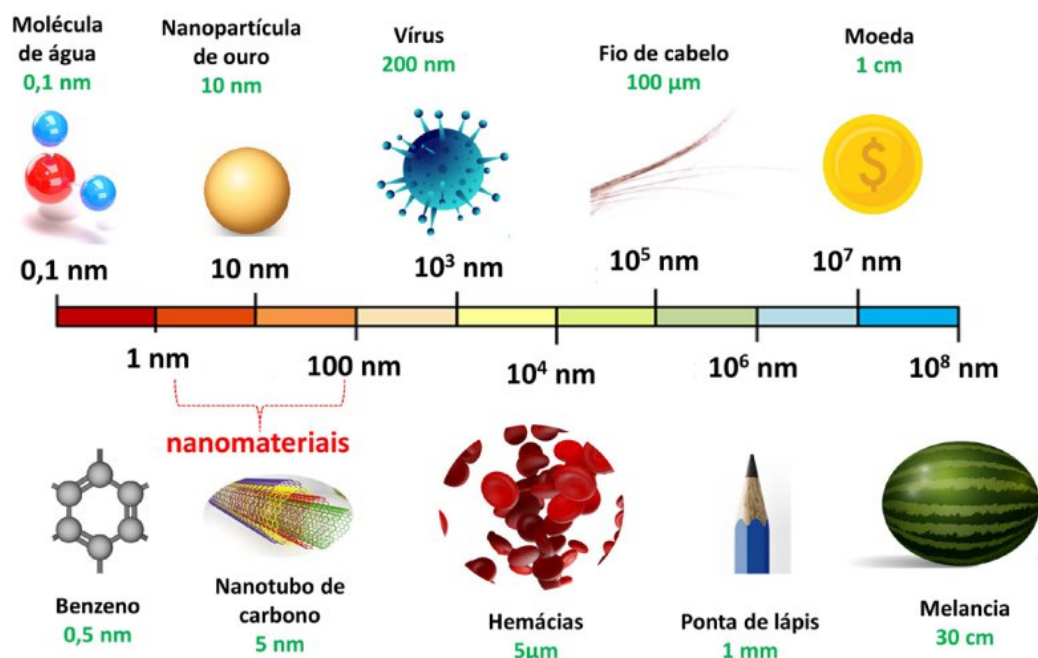


Figura 1: Comparação dimensional entre diferentes nanomateriais e estruturas biológicas.

Fonte: Sanfelice et al. (2022)

A Nanociência é a ciência que estuda os materiais que possuem ao menos uma dimensão dentro da escala nanométrica, entre 1 e 100 *nm*, e a Nanotecnologia diz respeito ao estudo de suas aplicações tecnológicas. Dessa forma, materiais que apresentam ao menos uma de suas dimensões dentro desse intervalo são classificados como nanomateriais e suas respectivas propriedades cujos processos de manipulação, síntese e caracterização são partes fundamentais para esses estudos.

Vale ressaltar que o intervalo de tamanho apresentado não é um consenso entre os pesquisadores na área, uma vez que materiais que possuem dimensões de tamanhos um pouco maiores aos apresentados podem apresentar propriedades semelhantes. [3]

A figura 1 ilustra alguns dos materiais pertencentes à nanoescala, comparando-os com materiais volumétricos (fora da nanoescala).

3.1.3 Por que nano?

Materiais que não possuem nenhuma dimensão na escala nanométrica são frequentemente chamados de material volumétrico, tradução do termo em inglês “bulk material”. Em tais materiais, fatores como tamanho e formato não interferem em suas propriedades físicas.

Já os nanomateriais apresentam algumas propriedades físicas, químicas, ópticas e elétricas diferentes em relação àquelas apresentadas pelos mesmos materiais na macroescala. Isso ocorre devido aos efeitos quânticos e de superfície, pois estes tornam-se mais significativos em materiais com dimensões menores, aproximando-os ao tamanho de átomos e moléculas. [2]

Uma das propriedades mais marcantes dos nanomateriais é o aumento da área superficial, que resulta em um aumento da razão entre área superficial e volume. Como consequência, tem-se uma maior reatividade (em razão da maior energia de superfície do material) e uma maior velocidade de uma reação química, pois há maior área disponível para contato entre as partículas.

A forma como os nanomateriais interagem com as ondas eletromagnéticas também difere do comportamento dos materiais volumétricos. Na nanoescala, os efeitos quânticos tornam-se significativos, gerando fenômenos ópticos e eletrônicos únicos, como o confinamento quântico em nanopartículas semicondutoras. São justamente essas peculiaridades que tornam a nanotecnologia uma área tão promissora para a ciência moderna.

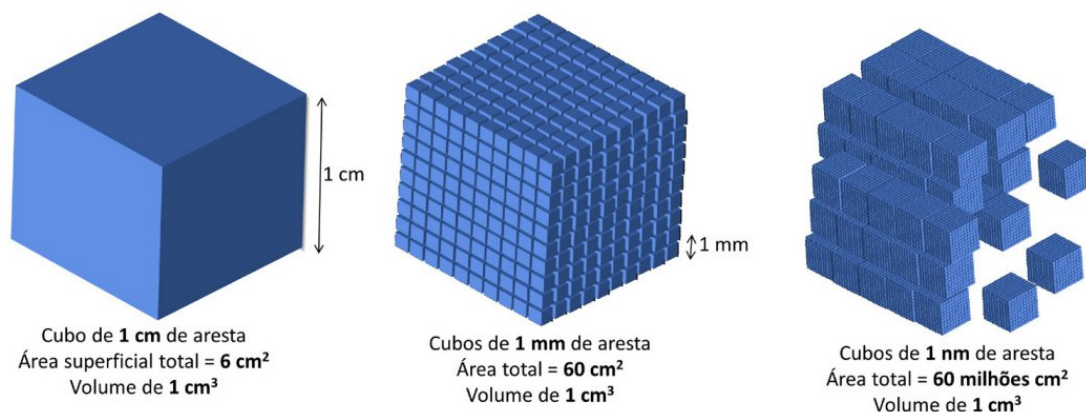


Figura 2: Ilustração do aumento significativo da razão entre área superficial e volume de um cubo com aresta inicial de 1 cm, após sua subdivisão em cubos menores com arestas de 1mm e 1nm. Em todas as situações, o volume total permanece constante, igual a 1 cm³.

Fonte: Sanfelice et al. (2022)

3.2 Técnicas de nanocaracterização

As técnicas de nanocaracterização são essenciais para visualizar os nanomateriais, compreender sua estrutura, morfologia, tamanho, composição e estado de aglomeração. Seu desenvolvimento é essencial para o desenvolvimento de aplicações para os nanomateriais.

3.2.1 Microscopia eletrônica de transmissão

O microscópio eletrônico de transmissão (MET) utiliza um feixe de elétrons de alta energia ao invés da luz visível, como ocorre nos microscópios ópticos. Esse feixe de elétrons é acelerado e focalizado na amostra por lentes eletromagnéticas, minimizando distorções e ampliando a imagem resultante.

O MET pode ser utilizado com o objetivo de produzir imagens ampliadas e de alta resolução de partículas muito pequenas, permitindo a visualização de seu formato, tamanho e disposição.

3.2.2 Espectroscopia de absorção no ultravioleta-visível (UV-Vis)

A espectroscopia de absorção no ultravioleta-visível (UV-Vis) é uma técnica que permite medir a quantidade de luz absorvida (absorbância) por uma amostra em diferentes comprimentos de onda. Ela funciona com base no princípio da absorção de luz e das transições eletrônicas: quando a luz UV ou visível atravessa uma amostra, certos comprimentos de onda são absorvidos, dependendo da estrutura do composto. De acordo com a lei de Beer-Lambert,

a absorbância aumenta com a concentração, permitindo análises quantitativas precisas.

3.2.3 Radioluminescência

A radioluminescência ou cintilação é o processo de luminescência com o estímulo de radiação ionizante. Dessa maneira, ao medir a radioluminescência de um material cintilador, por exemplo, pode-se compreender o espectro e a intensidade de emissão da luz visível. Essa emissão ocorre pois a radiação transfere energia para os elétrons do material, que passarão a ocupar um nível de energia mais elevado e depois retornarão ao seu estado fundamental liberando a diferença de energia em forma de fótons.

O equipamento para medir o espectro de radioluminescência consiste em um tubo de raios X acoplado a um espectrofotômetro. Ao incidir na amostra, o feixe de raios X causa a emissão da radioluminescência que, por sua vez, é coletada por uma fibra ótica e direcionada ao espectrofotômetro.

3.2.4 Espectroscopia de Fluorescência

O fluorímetro é um equipamento utilizado para quantificar a emissão de fluorescência de uma amostra após sua excitação por uma fonte de radiação luminosa. Ao retornarem ao estado fundamental, as moléculas excitadas emitem fótons cuja intensidade é diretamente proporcional à concentração da substância de interesse na solução. Devido à sua elevada sensibilidade, essa técnica é ideal para detectar concentrações de compostos fluorescentes.

3.3 Fotossensibilizador

O fotossensibilizador (PS) é uma molécula que quando submetida a uma fonte de luz com comprimento de onda em uma faixa específica, em geral na região do visível, é capaz de absorver energia, sendo excitada para seu estado singlete.

Uma vez no estado singlete, pode retornar ao seu estado fundamental por meio de duas maneiras diferentes: por fluorescência (processo rápido, não envolve mudança de spin, sem estágio intermediário), ou sofrer um processo de inversão de spin denominado cruzamento intersistemas, indo para o estado triplete excitado [4] (estado intermediário) e retornando ao estado fundamental por meio da perda de energia por fosforescência (processo lento, envolve mudança de spin) ou pela transferência de energia ou carga para moléculas do substrato. Isso porque no estado triplete (que tem um tempo de vida longo), a

molécula tem tempo suficiente para colidir ou interagir com o meio, transferindo sua energia ou elétrons para moléculas vizinhas (substrato). Esses dois últimos processos são responsáveis por produzir espécies reativas de oxigênio que causam danos em tecidos biológicos e podem levar a morte das células de câncer o tratamento de PDT e X-PDT.

Os fotossensibilizadores podem ser categorizados por algumas estruturas básicas, tais como porfirina, clorinas e ftalocianina. Também podem ser divididos em diferentes gerações de acordo com as suas capacidades funcionais, sendo primeira, segunda e terceira geração. [5]

Para um fotossensibilizador ser ideal para a x-pdt, sua faixa de absorção deve ser analisada, preocupando-se com um “quenching” adequado, isto é, analisar se a absorbância do fotossensibilizador corresponde com a faixa de emissão do cintilador, fazendo com que a combinação desses dois materiais seja efetiva.

3.4 Cintiladores

Cintiladores são materiais que conseguem transformar a energia de radiações ionizantes (como raio-X, raio gama, partículas alfa ou beta) em luz visível. O processo de cintilação em semicondutores e isolantes ocorre fundamentalmente em três estágios sucessivos: conversão, transporte e luminescência. No primeiro estágio, a interação com a radiação X promove a geração de múltiplos elétrons e lacunas livres nas camadas atômicas internas, majoritariamente via efeito fotoelétrico e efeito Compton. Em seguida, o preenchimento dessas lacunas internas se dá por processos em cascata que incluem a emissão de fluorescência de raios X, a ejeção de elétrons Auger e a relaxação térmica. Durante essa fase de transporte, os elétrons e lacunas migram, respectivamente, para a banda de condução (ou orbital LUMO, em sistemas moleculares) e para a banda de valência (ou orbital HOMO). Por fim, a radioluminescência é gerada mediante a recombinação radiativa desses portadores de carga, que compete com transições não radiativas, sendo a eficiência desse processo governada pelo rendimento quântico intrínseco do material cintilador [6]. A intensidade da radioluminescência é proporcional à taxa de dose de dose de radiação que, por sua vez, é proporcional à fluência do feixe de raios X.

Em alguns casos, o material sozinho não possui a característica de cintilador. No entanto, devido ao processo de dopagem, isto é, adicionar certas impurezas na estrutura cristalina de um material, ele pode se tornar um cintilador [7]. Esse

é o caso das nanopartículas de $\text{BaSO}_4\text{:Tb}$, foco desse estudo, que foram dopadas com o elemento Tório, pertencente à série dos lantanídeos (terras raras).

3.5 Diagrama de Jablonski

Assim como na PDT tradicional, a X-PDT envolve a excitação dos fotossensibilizadores para diferentes estados energéticos, seguida de processos de relaxação e transferência de energia que resultam na formação de espécies reativas de oxigênio (ROS) [8]. As mudanças de energia envolvidas nesse processo estão mostradas no diagrama de Jablonski apresentado na Figura 3.

Conforme ilustrado no diagrama, os raios X excitam as nanopartículas cintiladoras, que passam a emitir luz em comprimentos de onda compatíveis com a absorção do fotossensibilizador. Essa energia é transferida principalmente por meio de transferência de energia por ressonância de Förster (FRET), um processo não radiativo que depende da sobreposição entre os espectros de emissão do doador e absorção do receptor [9].

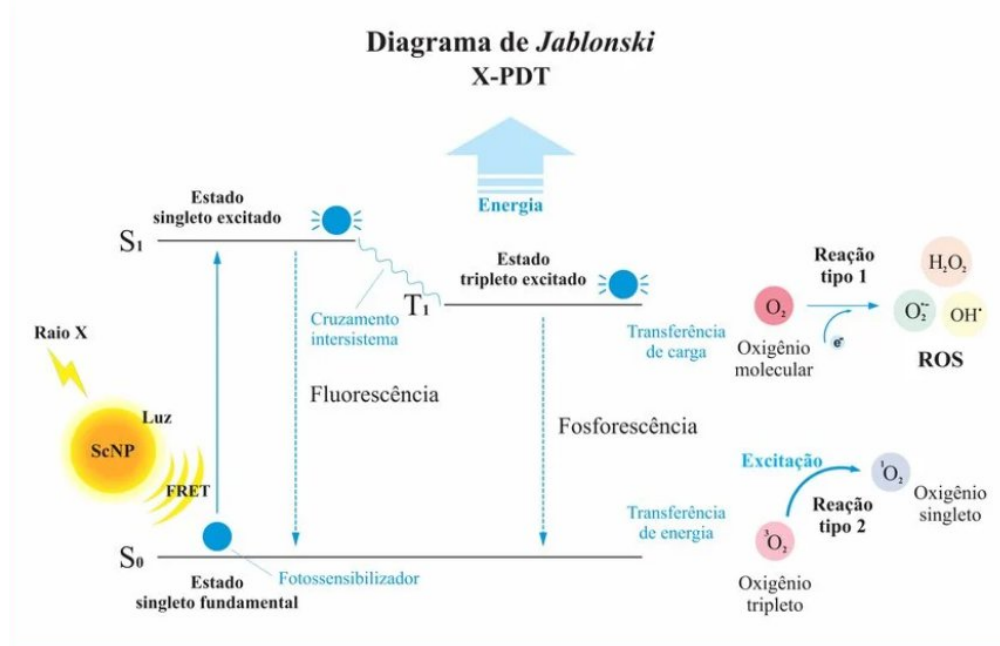


Figura 3: Diagrama de Jablonski dos estados energéticos da X-PDT

Fonte: Lovatto et al. (2023)

A excitação promove o fotossensibilizador do estado fundamental S_0 para o estado excitado S_1 , de maior energia. A partir desse estado, ele pode retornar

ao S_0 por emissão de fluorescência ou por dissipação não radiativa na forma de calor. Alternativamente, pode ocorrer cruzamento intersistema para o estado tripleto T_1 , mais estável e de maior tempo de vida, permitindo reações fotoquímicas mais eficientes.

Nesse estado, o fotossensibilizador participa de reações do tipo 1 e 2, fundamentais na PDT e na X-PDT. Na via tipo 1, há transferência de elétrons para o oxigênio, formando ROS como H_2O_2 , $O_2^{\bullet-}$ e $OH^{\bullet}$. Já na via tipo 2 ocorre transferência de energia para o oxigênio tripleto (3O_2), gerando oxigênio singleto (1O_2)

3.6 Interação entre raios X e materiais

Os raios-X podem interagir com os materiais através de vários processos físicos, como: Espalhamento Rayleigh (elástico), Efeito fotoelétrico, Efeito Compton, Produção de Pares e Reação Fotonuclear. Para este estudo, destaca-se a relevância do Efeito Fotoelétrico.

Neste processo, elétrons são ejetados após a absorção dos fótons de raios X, com lacunas correspondentes sendo geradas simultaneamente no orbital atômico. Subsequentemente, a lacuna é preenchida por um elétron de uma órbita mais externa, liberando fluorescência de raios X. Se o fóton de fluorescência de raios X for absorvido por outro elétron ligado, em vez de ser emitido pelo átomo, um elétron Auger é ejetado, o qual viaja por apenas uma curta distância (aproximadamente $10nm$) [6]. Quando a energia dos raios X está abaixo de centenas de keV, o processo fotoelétrico é dominante.

4. Materiais e Métodos

4.1 Síntese das NPs de BaSO₄:Tb e recobrimento com o fotossensibilizador

As nanopartículas de sulfato de bário (BaSO₄) foram sintetizadas pelo método de coprecipitação química. Inicialmente, soluções aquosas contendo íons bário (Ba²⁺) e sulfato (SO₄²⁻) foram preparadas separadamente. Em seguida, sob agitação constante, as soluções foram misturadas, promovendo a formação de um precipitado branco de BaSO₄ devido à sua baixa solubilidade em água. Após a precipitação, o material foi submetido a etapas de lavagem por centrifugação para remoção de impurezas e, posteriormente, seco a 80 °C em forno à vácuo para a obtenção das nanopartículas.

A dopagem das nanopartículas de BaSO₄ com íons térbio (Tb³⁺) foi realizada durante a síntese. Para isso, os íons Tb³⁺ foram adicionados à solução contendo os íons Ba²⁺ antes da etapa de precipitação. Durante a formação do BaSO₄, parte dos íons Tb³⁺ foi incorporada à estrutura cristalina do material hospedeiro, ocupando posições próximas aos dos íons Ba²⁺.

Após a síntese das nanopartículas de BaSO₄:Tb, o fotossensibilizador Rosa Bengala (RB) foi incorporado por adsorção superficial. Para isso, as nanopartículas foram dispersas em um solvente apropriado e misturadas com uma solução de RB sob agitação contínua. Em seguida, o excesso de RB não adsorvido foi removido por etapas sucessivas de centrifugação e lavagem.

4.2 Caracterização morfológica e estrutural das NPs

A morfologia e tamanho das amostras foi analisada por meio da microscopia eletrônica de transmissão (MET) no microscópio modelo JEOL-JEM-100 CXII com feixes de elétrons de 100 kV. O ensaio permitiu quantificar o tamanho médio, mapear a distribuição de tamanho e identificar o formato, além de verificar a existência de poros na estrutura do material. As amostras foram gotejadas sobre um graticulo de cobre coberta com um polímero condutor e submetido a um processo de secagem à temperatura ambiente. As imagens resultantes foram processadas usando o software Image-J.

4.3 Determinação dos espectros de emissão das NPs de BaSO₄:Tb

As medidas de cintilação/radioluminescência (RL) foram realizadas com um tubo de raios X (Magnum, Moxtek, EUA), operando a 48 kVp e 0,2 mA. A luz emitida foi coletada usando um espectrômetro Ocean Optics

(USB4000) acoplado a uma fibra óptica e processada com o software SpectraSuite.

4.4 Medição da absorbância do fotossensibilizador Rosa Bengala (RB)

Essa medição foi feita com o auxílio da técnica de espectroscopia de absorção no ultravioleta-visível (UV-Vis) usando o espectrofotômetro Ultrospec 2100 pro (Amersham Pharmacia).

4.5 Mensuração dos espectros de emissão das NPs de BaSO₄:Tb@RB

As medidas de cintilação/radioluminescência (RL) das NPs de BaSO₄:Tb@RB foram realizadas da mesma maneira que as medidas das NPs de BaSO₄:Tb, descrito no item 4.3.

4.6 Avaliação da produção de espécies reativas de oxigênio (ROS)

A produção de espécies reativas de oxigênio (ROS) foi avaliada por meio da medição da fluorescência de uma solução contendo água, etanol, DPBF e nanopartículas de BaSO₄:Tb@RB (BaSO₄:Tb recoberto com Rosa Bengala), além de um grupo controle: contendo água, etanol, DPBF e nanopartículas de BaSO₄:Tb, sem a funcionalização com PS.

Para essa avaliação, as amostras foram irradiadas com diferentes doses de raios X. Em seguida, utilizando um fluorímetro, foi determinada a intensidade de fluorescência de cada amostra. As variações observadas na intensidade de fluorescência foram utilizadas como indicativo da formação de espécies reativas de oxigênio. As medidas de fluorescência foram realizadas em um espectrofluorômetro Hitachi F-7000, equipado com uma lâmpada de arco de xenônio de 150 W e um tubo fotomultiplicador operando a 700 V, utilizando-se uma cubeta de quartzo.

5. Resultados e discussão

5.1 Tamanho e morfologia

As imagens obtidas com o microscópio eletrônico de transmissão, representadas na Figura 4, permitiram a obtenção de alguns dados sobre as NPs. É possível observar uma morfologia predominantemente poliédrica e facetada, apresentando formatos irregulares, com algumas nanopartículas apresentando contornos bem definidos e outras exibindo contornos menos regulares. O tamanho das NPs não é uniforme, aproximando-se de $34 (34 \pm 8,13) \text{ nm}$, o que indica certa polidispersidade.

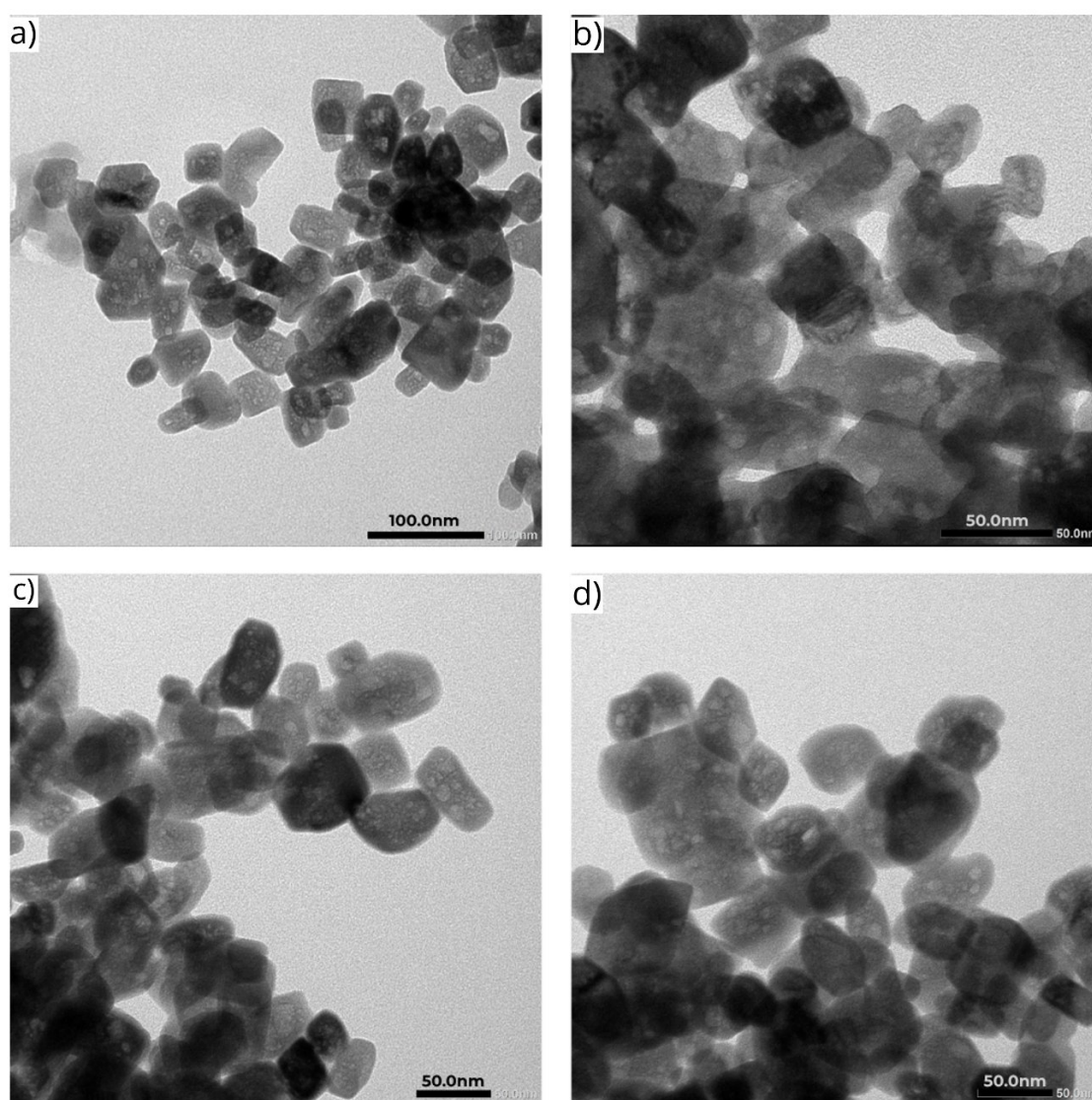


Figura 4 (a, b, c, d): imagens de MET das NPs recém sintetizadas

Observam-se, em algumas regiões, aglomerados de NPs, caracterizados por elevadas concentrações, evidenciadas pelo tom mais escuro nessas áreas das

imagens, provavelmente associados ao processo de secagem. Além disso, é possível identificar a presença de poros na estrutura das NPs, visualizados como pontos claros dentro das nanopartículas, distribuídos de maneira heterogênea, uma vez que nem todas apresentam a mesma quantidade e o mesmo tamanho de poros.

5.2 Absorbância da RB e RL das ScNPs

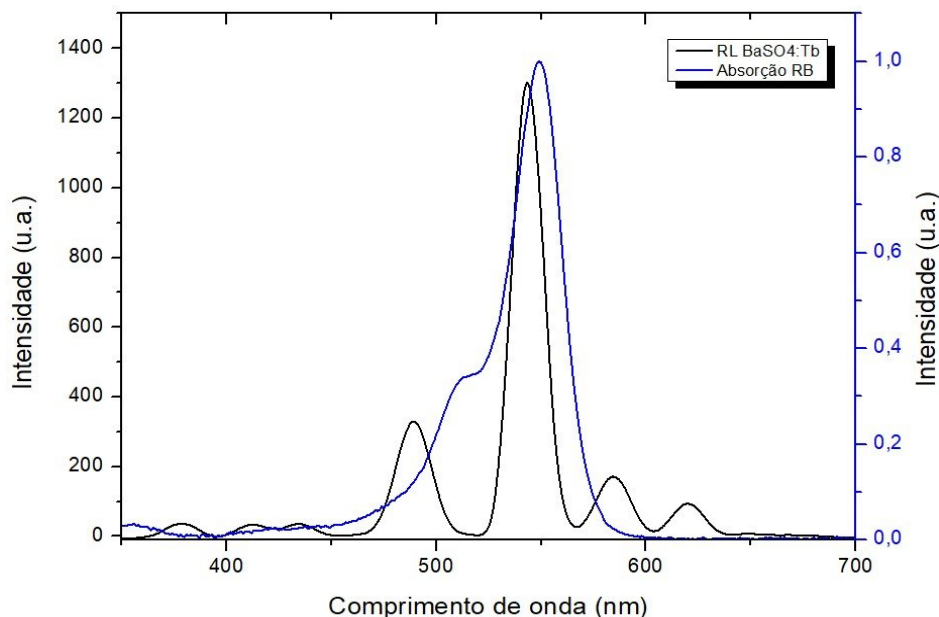


Figura 5: Gráfico da absorbância do RB e da RL de BaSO₄:Tb

A respeito das medidas de absorbância da Rosa Bengala e da Radioluminescência das ScNPs de BaSO₄:Tb, foi montado gráfico da Figura 5.

Em azul, observa-se a intensidade de absorção de luz em diferentes comprimentos de onda pela RB, medida em unidades arbitrárias (u.a.). Os valores, que estão contidos no intervalo entre 0,0 u.a. (valor mais baixo) e 1,0 u.a. (maior valor de absorção) são diretamente proporcionais a quantidade de luz absorvida por esse fotossensibilizador.

Desse modo, ao analisar a curva em azul, conclui-se que a absorção mostra-se mais significativa para fótons com comprimentos de onda entre 520 e 570 nm, que corresponde as cores próximas ao verde e ao amarelo/laranja; ela ainda ocorre para valores um pouco maiores ou menores do que esse intervalo, porém com menor intensidade. Além disso, o pico de absorção (valor mais alto), com

intensidade de 1 u.a., encontra-se no ponto de comprimento de onda igual a 550 *nm*, que corresponde ao verde. Há também um pico secundário, na faixa dos 500 *nm*. Para luz com comprimentos de onda maiores que 600*nm*, a absorção aproxima-se ao valor de 0,0 u.a.. Tal fato pode ser explicado pelo fato de que o Rosa Bengala é um corante rosa, logo, possui um comportamento de reflexão seletiva: reflete a luz vermelha e, em menor intensidade, uma mistura do espectro que inclui o violeta/azul para criar a tonalidade rosa.

Em preto, tem-se a medição radioluminescência (RL) das nanopartículas cintiladoras (ScNPs) de BaSO₄:Tb. Ao serem excitadas por raios X, essas ScNPs emitem luz no comprimento de onda da luz visível e a intensidade em que cada comprimento de onda é emitido está representada no gráfico, com medidas que variam de 0 u.a. até 1300 u.a..

Realizando uma análise da curva preta, é possível identificar uma banda de emissão predominante na região de comprimento de onda de 545 *nm*, correspondente à cor verde, com intensidade de 1300 u.a.. Além disso, existem picos secundários nas regiões de 480 *nm*, 580 *nm* e 630 *nm*, com intensidades de 300 u.a., 200 u.a. e 100 u.a., respectivamente. A emissão predominante (em 545*nm*) possui intensidade mais de três vezes maior que a emissão do maior pico secundário (480 *nm*), o que a torna mais expressiva e considerável.

A intensa emissão na região dos 545 *nm* é explicada pela presença do Térbio (íon Tb³⁺), dopante responsável pela cintilação, na matriz cristalina das ScNPs. Ele é um elemento bem conhecido e apresenta picos de emissões característicos devido às transições que ocorrem em $^5D_4 \rightarrow ^7F_j$ ($j=0-6$). Dentre essas emissões, a mais intensa é a $^5D_4 \rightarrow ^7F_5$ que ocorre na região 540–555 *nm*, referente à emissão no verde [10, 11]. A predominância da banda em 545 *nm*, observada no espectro de radioluminescência, indica que a transição $^5D_4 \rightarrow ^7F_5$ é o principal canal de emissão do Tb³⁺ nas nanopartículas sintetizadas.

Analisar os espectros de absorbância da RB e a RL das NPs de BaSO₄:Tb é essencial para concluir se uma conjugação seria viável. Como destacado, o BaSO₄:Tb emite intensamente na região dos 545 *nm*, enquanto o gráfico da absorbância da RB possui um pico na região dos 550 *nm*. Ambos os picos coincidem, indicando que, na conjugação, a RB será capaz de absorver a maior parte da luz que as ScNPs emitirem, gerando menor perda de energia e maior eficiência no processo, graças à sobreposição apresentada nesse gráfico.

5.3 RL das NPs de BaSO₄:Tb@RB (funcionalizadas)

Após o recobrimento das nanopartículas de BaSO₄:Tb, mediu-se a RL das NPs de BaSO₄:Tb@RB, cujos resultados estão apresentados na Figura 6. Os valores, expressos em unidades arbitrárias (u.a.), distribuem-se aproximadamente entre 0 e 7000 u.a.

A curva vermelha representa a RL das ScNPs de BaSO₄:Tb. Quando excitadas por radiação ionizante, essas nanopartículas emitem luz em diferentes comprimentos de onda, e a intensidade correspondente a cada emissão encontra-se representada na Figura 6. Esses resultados já foram apresentados e discutidos anteriormente, no item 5.2.

A curva preta corresponde à RL das NPs de BaSO₄:Tb@RB, isto é, ScNPs após o recobrimento com a RB. Nesse caso, os valores obtidos situam-se no intervalo de 0 a aproximadamente 800 u.a. Observa-se que a banda de emissão predominante e os picos secundários permanecem nos mesmos comprimentos de onda verificados antes do recobrimento, porém com intensidades significativamente menores.

A redução da intensidade de emissão pode ser utilizada como evidência da transferência de energia da cintilação para o fotossensibilizador, presente apenas na amostra representada pela curva preta. A maior parte da luz emitida pelas nanopartículas foi absorvida pela RB adsorvida em sua superfície, uma vez que os espectros de absorção da RB e de RL das ScNPs de BaSO₄ apresentam sobreposição, conforme discutido no item 5.2, favorecendo o processo de transferência de energia.

A eficiência de transferência de energia (η) foi calculada segundo a expressão:

$$\eta = (1 - I_{DA}/I_D) \times 100 \quad [12]$$

em que I_{DA} representa a intensidade do doador na presença do aceitador e I_D representa a intensidade do doador na ausência do aceitador. No presente trabalho, as NPs de BaSO₄:Tb são os doadores, o aceitador é representado pela RB, I_{DA} corresponde à RL integrada das NPs funcionalizadas BaSO₄:Tb@RB, enquanto I_D corresponde à RL integrada das NPs de BaSO₄:Tb. Vale ressaltar que as medidas foram realizadas sob as mesmas condições experimentais, incluindo tempo de exposição à radiação, posicionamento da amostra e massa utilizada.

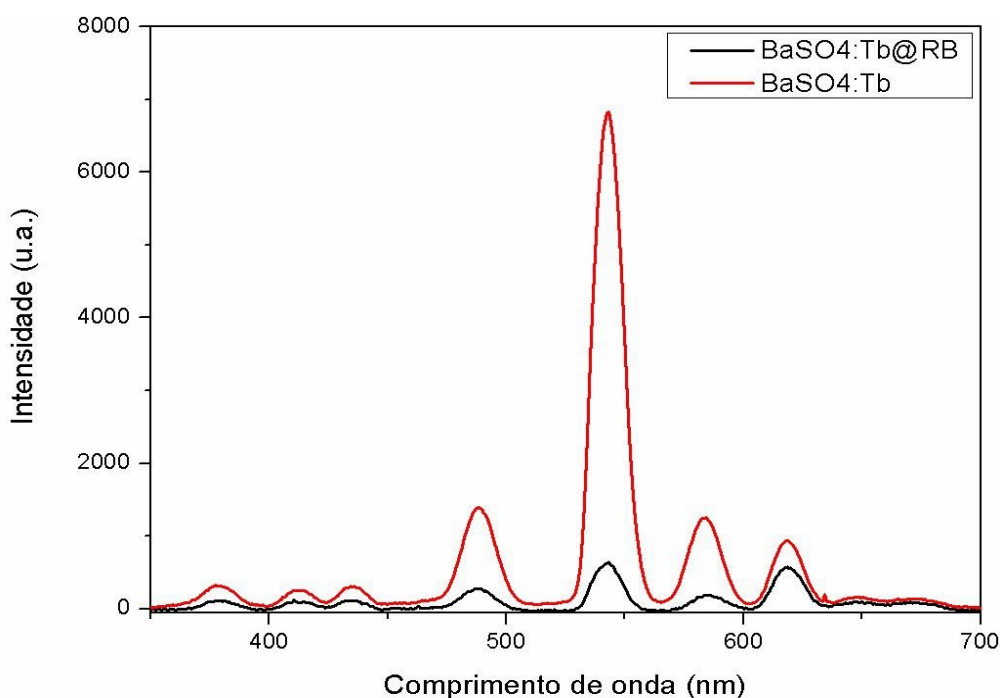


Figura 6: Comparação entre a intensidade da RL das NPs de BaSO₄:Tb e de BaSO₄:Tb@RB

Os valores obtidos para a área integrada dos espectros de RL foram de 26.539 para as NPs de BaSO₄:Tb@RB e 192.389 para as NPs de BaSO₄:Tb. A integração permite avaliar a emissão total do sistema, considerando a contribuição conjunta de todos os comprimentos de onda, em vez de se restringir à análise de valores pontuais ou de bandas específicas.

Por fim, conclui-se que a eficiência de transferência de energia do sistema é de ~86%. Esse resultado indica que a RB absorve aproximadamente 86% da energia convertida pelas nanopartículas, sugerindo que aproximadamente 14% da energia convertida pelas nanopartículas não foi transferida para a RB.

5.4 Geração de espécie reativas de oxigênio (ROS) em soluções

Como descrito na seção “Materiais e métodos”, a avaliação do processo de formação de ROS foi feita a partir dos dados coletados por um fluorímetro e, inicialmente, foram preparadas duas soluções, dentre as quais uma era parte do grupo controle.

Para essa análise, foi utilizado o 1,3-difenilisobenzofurano (DPBF), uma sonda fluorescente sensível à presença de espécies reativas de oxigênio.

Quando os raios X interagem com a água, ocorre sua radiólise, resultando na formação dessas espécies reativas. As ROS reagem com o DPBF, promovendo sua degradação oxidativa e, conseqüentemente, a diminuição da intensidade de fluorescência da solução. Dessa forma, a formação de oxigênio singlete pode ser monitorada indiretamente pela redução da fluorescência do DPBF, sendo a quantidade de ROS gerada inversamente proporcional à intensidade de fluorescência observada.

A primeira solução, pertencente ao grupo controle, era composta por água, etanol, DPBF e nanopartículas de BaSO₄:Tb. Essa solução foi irradiada com diferentes doses de raios X, e sua fluorescência foi monitorada após cada irradiação. Observou-se uma diminuição discreta da intensidade de fluorescência em função do aumento da dose de radiação, sendo essa redução menor do que a observada para a segunda solução, conforme apresentado na Figura 7.

Esse comportamento pode estar relacionado à presença das nanopartículas, que, devido ao elevado número atômico efetivo proporcionado principalmente pelo bário ($Z = 56$), apresentam maior capacidade de absorção da radiação X. Dessa forma, parte da energia incidente pode ter sido absorvida pelas nanopartículas, reduzindo a geração de espécies reativas de oxigênio no meio e, conseqüentemente, a degradação do DPBF, gerando a pequena perda de fluorescência.

O objetivo pelo qual essa solução foi preparada é mostrar que apenas as ScNPs não têm a capacidade de induzir a formação de ROS, elas apenas converteram a energia recebida em luz. Os dados relacionados a essa solução estão presentes na figura 7, representados por “NP + DPBF”, em preto.

A mesma medição foi realizada para a segunda solução, composta por água, etanol, DPBF, nanopartículas de BaSO₄:Tb recobertas por Rosa Bengala (BaSO₄:Tb@RB). Após a exposição a diferentes doses de raios X, essa solução apresentou um comportamento diferente da anterior: a queda da fluorescência foi mais acentuada, indicando que houve maior degradação da sonda e maior formação de ROS.

Como ocorrido com a solução um, houve também maior deposição de energia nas NPs de BaSO₄:Tb@RB do que na água (devido ao elevado número atômico efetivo) mas, dessa vez, essa energia deu início ao processo da X-PDT: as ScNPs converteram a energia fornecida pelos raios X em luz no comprimento

de onda da luz visível para que aconteça a ativação do fotossensibilizador, seguida da formação de ROS, nesse caso o oxigênio singlete. Assim, o DPBF reage com o oxigênio singlete, formando um endoperóxido intermediário, que posteriormente se decompõe em 1,2-dibenzoilbenzeno (DBB) [L], causando forte supressão da fluorescência do DPBF.

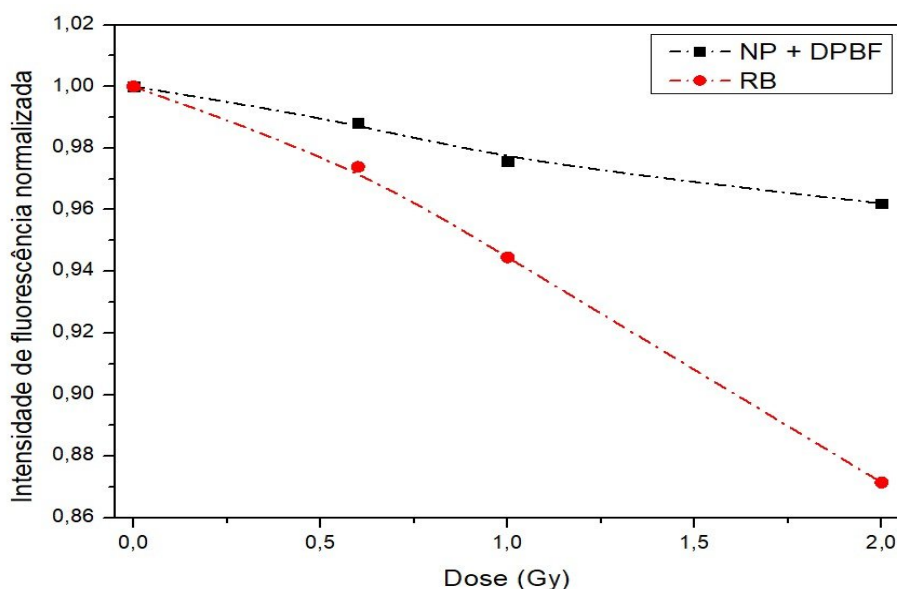


Figura 7: Análise da fluorescência de soluções contendo $\text{BaSO}_4\text{:Tb} + \text{DPBF}$ e $\text{BaSO}_4\text{:Tb@RB} + \text{DPBF}$

Esses resultados podem ser comprovados pela análise da figura 7, em que os dados relacionados a essa solução estão representados apenas como “RB”, em vermelho.

6. Conclusão

Neste trabalho, foram sintetizadas e caracterizadas nanopartículas cintiladoras de BaSO₄:Tb, bem como realizado seu recobrimento com o fotossensibilizador Rosa Bengala. Pôde-se analisar as medidas de absorbância da RB e a emissão de RL do BaSO₄:Tb. Devido à sobreposição observada no gráfico da Figura 5, ambas as substâncias podem ser aplicadas em conjunto no processo de X-PDT, uma vez que possibilita a transferência de energia das ScNPs para o PS.

Calculou-se a eficiência da transferência de energia da cintilação das ScNPs para o PS, obtendo-se o valor de 86%. Esse resultado evidencia a elevada capacidade da RB em absorver a energia emitida pelas nanopartículas cintiladoras produzidas nesse estudo, indicando uma interação eficiente entre os componentes do sistema. Comprovou-se também a geração de ROS em soluções contendo as ScNPs recobertas pelo PS (BaSO₄:Tb@RB), confirmando a hipótese proposta e ampliando as possibilidades de combinação entre nanopartículas e fotossensibilizadores para aplicação em X-PDT. As nanopartículas de BaSO₄:Tb@RB, responsáveis pela formação de ROS, podem ser consideradas nanopartículas funcionalizadas, uma vez que, após o recobrimento com RB, passaram a induzir a produção de ROS em solução.

Portanto, as nanopartículas de BaSO₄:Tb@RB demonstraram potencial promissor para aplicação na terapia fotodinâmica ativada por raios X, combinando a eficiente absorção de energia dos raios X com a geração de ROS em estudos em solução, o que pode aumentar a eficácia terapêutica em aplicações no tratamento do câncer. Estudos futuros devem focar em avaliações *in vitro*, a fim de investigar com maior profundidade sua segurança biológica e sua aplicabilidade clínica.

7.Referências

- [1] TONET, Michele Duarte; LEONEL, André Ary. Nanociência e nanotecnologia: uma revisão bibliográfica acerca das contribuições e desafios para o ensino de Física. Caderno Brasileiro de Ensino de Física, v. 36, n. 2, p. 431-459, ago. 2019. DOI: <https://doi.org/10.5007/2175-7941.2019v36n2p431>
- [2] CASTRO, Denise Leal de; CAVALCANTE, Maxwell de Paula; PEDROSA, Maria Clara Guimarães. Nanotecnologia e polímeros: revisão dos temas visando a abordagem em aulas de Química. Revista Thema, v. 16, n. 2, p. 313-330, 2019. DOI: <https://doi.org/10.15536/thema.V16.2019.313-330.1164>
- [3] CENTRO NACIONAL DE PESQUISA EM ENERGIA E MATERIAIS (CNPEM). Benefícios e riscos das nanotecnologias. Campinas: CNPEM, 2019. (Separata CNPEM, 02). Disponível em: https://cnpem.br/wp-content/uploads/2019/10/SEPARATA-CNPEM-02_Benef%C3%ADcios-e-riscos-das-nanotecnologias.pdf. Acesso em: 23 jun. 2026.
- [4] OLIVEIRA, K. T. de et al. Conceitos fundamentais e aplicações de fotossensibilizadores do tipo porfirinas, clorinas e ftalocianinas em terapias fotônicas. Revista Virtual de Química, v. 7, n. 1, p. 310–335, 2015.
- [5] AQUINO JÚNIOR, Antonio Eduardo de; CARBINATTO, Fernanda Mansano; BAGNATO, Vanderlei Salvador. Simplificando a terapia fotodinâmica para profissionais de saúde. São Carlos: Gráfica IFSC/USP, 2023. 76 p.
- [6] CHEN, Xiaofeng et al. X-ray-activated nanosystems for theranostic applications. Chemical Society Reviews, v. 48, n. 11, p. 3073-3101, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1039/c8cs00921j>
- [7] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY (IAEA). Nuclear medicine physics: a handbook for teachers and students. Vienna: IAEA, 2014. p. 196-213.
- [8] LOVATTO, Cristian; GOMES, Tobias; FAGAN, Solange. Terapia fotodinâmica ativada por raios X por intermédio de nanopartículas cintiladoras: revisão integrativa. Revista Portuguesa de Oncologia, v. 6, p. 48, 2023.
- [9] YÜ, H. et al. AIE-active photosensitizers: manipulation of reactive oxygen species generation and applications in photodynamic therapy. Biosensors, v. 12, n. 5, p. 348, 2022. DOI: <https://doi.org/10.3390/bios12050348>
- [10] WANG, Q. et al. A review on fluorescence intensity ratio thermometer based on rare-earth and transition metal ions doped inorganic luminescent materials. Journal of Alloys and Compounds, v. 850, art. 156744, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.156744>
- [11] SANTOS, Naiara Silva dos. Efeito da concentração de Eu^{3+} e Tb^{3+} na luminescência do Y_2O_3 produzido pela rota sol-gel utilizando matéria orgânica da água de rio. 2024. 101 f. Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Sergipe, São Cristóvão, 2024.
- [12] Szabó, Á., Szöllősi, J., & Nagy, P. (2022). Principles of resonance energy transfer. Current Protocols, 2, e625. doi: 10.1002/cpz1.625

[13] ŽAMOJC, K. et al. The development of 1,3-diphenylisobenzofuran as a highly selective probe for the detection and quantitative determination of hydrogen peroxide. *Free Radical Research*, v. 51, n. 1, p. 38–46, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1080/10715762.2016.1262541>

FIGURAS

Figura 1 e figura 2: SANFELICE, Rafaela C.; PAVINATTO, Adriana; CORRÊA, Daniel S. Introdução à nanotecnologia. In: *Nanotecnologia aplicada a polímeros*. São Paulo: Blucher, 2022. p. 27-47.

Figura 3: LOVATTO, Cristian; GOMES, Tobias; FAGAN, Solange. Terapia fotodinâmica ativada por raios X por intermédio de nanopartículas cintiladoras: revisão integrativa. *Revista Portuguesa de Oncologia*, v. 6, p. 48, 2023.



GATOS INSTÁVEIS

Memória de trabalho: uma análise através da óptica da
neurociência computacional

Isabella Stimer Eberhardt

Orientador: Prof. Dr. Antonio Carlos Roque da Silva Filho
Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da
Universidade de São Paulo

2026

Instituto Principia
Escola de talentos

Gatos Instáveis - turma 2024

Memória de Trabalho: uma análise através da ótica da Neurociência Computacional

Autor: Isabella Stimer Eberhardt

Orientador: Antônio Carlos Roque da Silva Filho

Paraná
Julho, 2026

Agradecimentos

Primeiramente, à minha família, que sempre me apoiou e esteve ao meu lado, com seu amor incrível.

Aos meus pais, meus melhores amigos, minha casa, que sempre me estimularam a entender o mundo, e muitas vezes deixaram de correr para que eu pudesse voar. Vocês são um mosaico no meu coração.

Ao Wellington, pela paciência e cuidado, e adedicação em todos os encontros e viagens.

Ao Instituto Principia, principalmente à Escola de Talentos, que mudou a minha visão sobre física e ciência, mostrando um novo mundo, deixando uma marca profunda na minha formação e aspirações científicas. A todos os professores que fizeram parte deste projeto, Ricardo Matheus, Leonardo de Lima, André Paschoal e Marcelo Guzzo sempre dispostos a nos ensinar, fundamental para despertar minha paixão pela pesquisa.

Ao professor Antonio Roque, meu orientador, que me guiou na síntese do meu projeto, abordando diversos tópicos, e me aproximando muito mais de uma grande paixão, a neurociência. Obrigada pela calma e disponibilidade, foi um privilégio imenso poder trabalhar com o senhor.

À minha turma, os Gatos Instáveis, companheiros dessa jornada e desafio, mas também de risadas e memórias, mesmo com a distância, o sentimento de pertencimento continua.

Aos meus professores do ensino médio, principalmente aos professores de física Willian Kolc e Samuel Leopolski, que tornaram o aprendizado fluído e leve, tendo sempre risadas em suas aulas, admiro muito os dois e sou grata por mostrarem que eu era mais do que imaginava.

Aos meus colegas e amigos, que fazem parte do meu dia a dia, obrigada pelas conversas variadas, pelos momentos de descontração e por mesmo sem fazer parte do projeto, me incentivaram e estiveram do meu lado.

Acima de tudo, a Deus, meu refrigerio, meu pai amoroso, que abriu essa oportunidade e me manteve em todas as dificuldades. Obrigada por sua graça imensurável.

A todas as pessoas que, de forma direta ou indireta, torceram por mim e contribuíram para este trabalho que é o reflexo do afeto e do suporte de cada um de vocês.

Resumo

Esta monografia transcorre pela fusão da Neurociência com a modelagem computacional, tendo como foco a memória de trabalho. A Neurociência tem como objeto o estudo o sistema nervoso, de modo multiescalar, desde o nível molecular até o sistêmico. Já a abordagem computacional é vista como uma ferramenta de análise, que atua na criação de modelos que "traduzem" fenômenos neurobiológicos em linguagem matemática, mas também designa que o cérebro, como um todo, realiza computações, em um sentido mais geral do termo. O objetivo da neurociência computacional é estudar e compreender processos e comportamentos, utilizando-se de modelos para isso. Serve para manter durante alguns segundos a informação que está sendo processada no momento. Dando continuidade aos nossos atos.

Já a memória de trabalho serve para determinar o contexto em que diversos acontecimentos, fatos ou outro tipo de informação ocorrem, se vale a pena ou não fazer uma nova memória disso ou se essa informação já consta dos arquivos.

A partir disso podemos entender com mais clareza diversas alterações biológicas, como doenças, síndromes e transtornos. Além da área com um crescimento exponencial, a Inteligência Artificial.

1 Introdução

Por início, alguns conceitos básicos devem ser introduzidos a fim de contextualizar e compreender melhor a temática.

As estruturas nervosas e sua complexidade quando conhecidas um pouco mais a fundo, trazem a clareza do motivo e das consequências de todo o funcionamento do Sistema nervoso, e em principal para essa pesquisa, a memória.

2 Sistema Nervoso

O sistema nervoso pode ser dividido em central e periférico (Figura 1). O Sistema Nervoso Central (SNC) é composto de dois órgãos principais o encéfalo, que integra o cérebro, e a medula espinhal. O cérebro ocupa a maior parte do encéfalo e nele se coordena variadas funções, se processa informações e é a base o raciocínio e linguagem

A outra subdivisão presente nele: os lobos cerebrais (Figura 2). São eles o frontal, occipital, temporal, parietal e da ínsula. A memória de trabalho é processada no lóbulo frontal, assim como o raciocínio, mas isso será discutido melhor mais adiante.

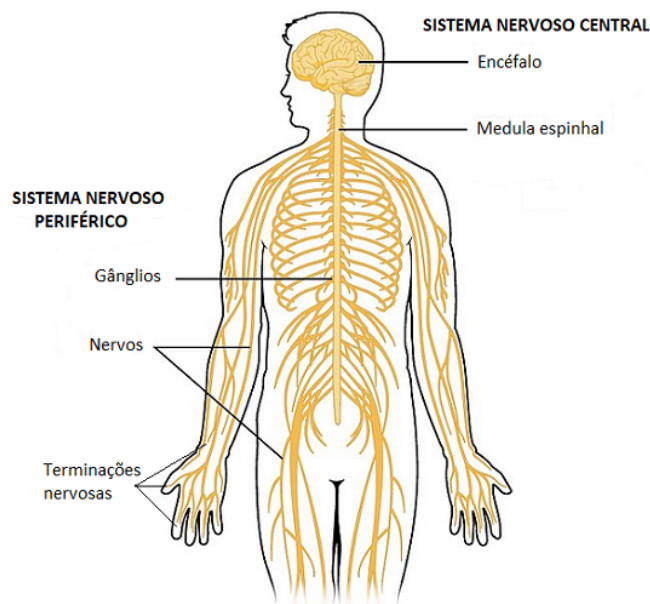


Figura 1: Sistema nervoso central e periférico. Crédito: imagem modificada de OpenStax, CC-BY-SA-4.0. Acesso em: 08/07/2026.

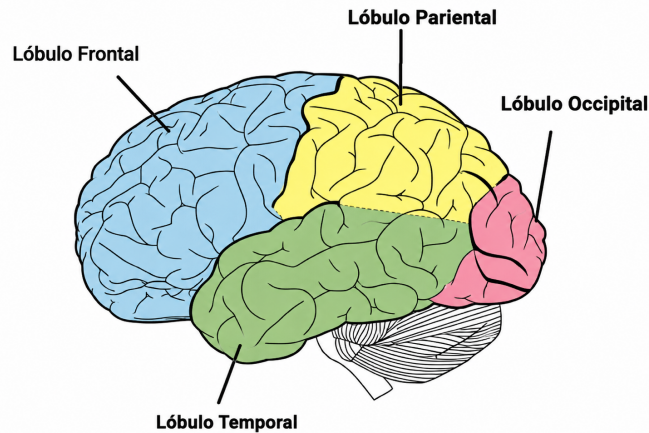


Figura 2: Anatomia dividida evidenciando os lobos cerebrais. Gray e Mysid (2006). Imagem modificada. Disponível em: wikipedia.org. Acesso em: 8 jul. 2026.

3 Os Neurônios

O Neurônio é a principal célula e a unidade funcional básica do sistema nervoso, acredita-se que existem 86 bilhões deles apenas no encéfalo.

Assim como as células comuns, os neurônios possuem membrana plasmática, ribossomo, núcleo, etc. O principal traço que difere os neurônios em relação às células em geral, reside na sua especialização para a comunicação intercelular.

Uma estrutura neuronal padrão compreende três componentes essenciais: os dendritos, a soma e o axônio (Figura 3). Os dendritos são a entrada para os sinais de outros neurônios, passando a ser transmitido para a soma, que processa e gera potenciais de ação, potenciais elétricos que ocorrem apenas se o estímulo for o suficiente. O potencial segue até o axônio, uma grande ramificação, que é o canal de saída. Nos fins desses canais são localizadas as sinapses.

Outro fator importante é que os neurônios não são células retransmissoras, mas sim células que modificam e adicionam informações, além de que, em consequência a suas múltiplas ligações com milhares de outras origens, ele integra diversos sinais e os envia de maneira não linear a milhares de novos neurônios.

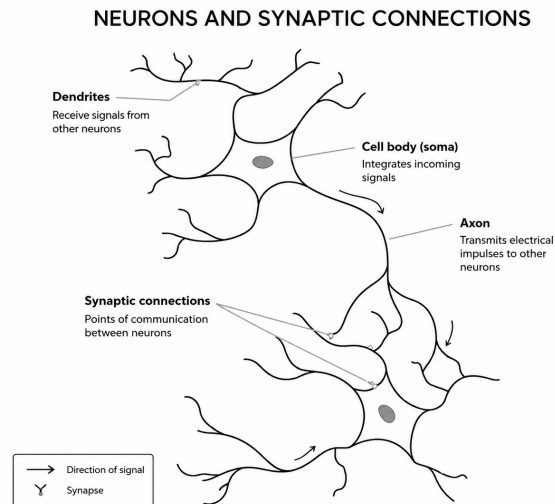


Figura 3: Esquema simplificado da comunicação entre neurônios por meio de conexões sinápticas.

4 Membrana e potencial de ação

A membrana neuronal atua como um capacitor, pois separa cargas elétricas entre o interior e o exterior da célula. Essa diferença de cargas gera uma diferença de potencial elétrico através da membrana. Considerando o lado de fora da célula como zero de voltagem, o lado de dentro do neurônio geralmente apresenta um potencial entre 50 e 90 mV. Isso significa que a face interna da membrana é eletricamente negativa em relação à face externa.

A permeabilidade da membrana a determinados íons depende das condições elétricas, químicas e mecânicas do ambiente em que a célula está imersa. Entre os principais íons envolvidos nesse processo estão o sódio e o potássio. O neurônio tende a concentrar potássio em seu interior e a expelir sódio para o exterior. Um dos mecanismos responsáveis por manter esse desequilíbrio é a bomba de sódio-potássio, formada por proteínas que utilizam energia metabólica, obtida pela hidrólise de ATP, para transportar três íons sódio para fora da célula e dois íons potássio para dentro. Esse processo ajuda a explicar o alto consumo energético das células nervosas.

Quando o potencial de membrana se torna mais negativo do que o potencial de repouso, diz-se que a célula está hiperpolarizada. Quando esse potencial fica menos negativo, aproximando-se de zero, ocorre a despolarização. Entretanto, para que um potencial de ação seja gerado, é necessário que a despolarização atinja um valor crítico, chamado limiar. Quando esse limiar é alcançado por uma corrente despolarizante suficientemente forte, ocorre uma mudança rápida e intensa na voltagem da membrana. O potencial de membrana torna-se positivo por cerca de meio milissegundo e, em seguida, retorna a valores negativos próximos ao potencial de repouso (Figura 4).

Os potenciais de ação são fundamentais para a comunicação entre neurônios, porque são o único tipo de alteração no potencial de membrana capaz de se propagar por grandes distâncias sem sofrer atenuação significativa. Outros tipos de despolarização ou hiperpolarização são fortemente reduzidos ao longo do caminho e, em geral, não se propagam por distâncias superiores a 1 mm.

A existência de um limiar para a geração do potencial de ação é importante porque impede

que pequenas flutuações aleatórias do potencial de membrana produzam sinais nervosos. Assim, apenas estímulos suficientemente relevantes, capazes de ultrapassar esse limiar, são transmitidos como informação ao longo do axônio e comunicados a outros neurônios.

Esse funcionamento segue a chamada lei do tudo ou nada. Se o estímulo não for forte o suficiente para atingir o limiar, nenhum potencial de ação será produzido. Porém, se o estímulo atingir ou ultrapassar o limiar, será gerado um potencial de ação completo, sempre com a mesma forma e amplitude, independentemente de o estímulo ser apenas suficiente ou muito mais intenso do que o necessário.

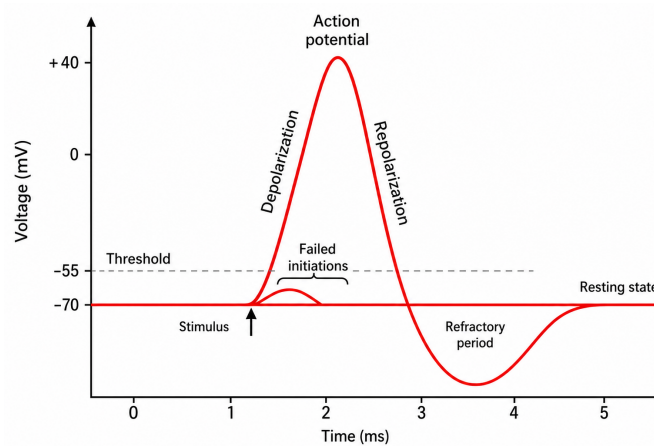


Figura 4: Fases de um potencial de ação e variações na voltagem da membrana neuronal ao longo do tempo. Fonte: Adaptado de Wikimedia Commons (Chris 73; Diberri; tiZom, CC BY-SA 3.0).

5 Sinapses

A sinapse é a região de conexão de dois neurônios. O neurônio transmissor é designado de pré-sináptico, o que recebe o sinal é designado de pós-sináptico. As sinapses não são juntas, existe uma fenda no meio delas chamada fenda sináptica. A conexão entre as células podem ser de caráter química ou elétrica. A sinapse química é mais abundante no cérebro, por isso terá um foco maior. Porém a maior diferença entre as duas é o fato da elétrica ser mais rápida na transmissão, e o sinal é bilateral, enquanto a química é lenta e unilateral. As sinapses químicas tendem a ser muito mais moduláveis que as elétricas, promovendo maior plasticidade sináptica, termo que será explicado adiante.

Em resumo, o funcionamento das sinapses químicas inicia-se com a chegada de um potencial de ação ao terminal pré-sináptico, desencadeando a abertura de canais de cálcio dependentes de voltagem (Figura 5). O influxo de íons Ca^{2+} promove a exocitose de vesículas sinápticas, liberando neurotransmissores na fenda sináptica. Essas moléculas difundem-se e ligam-se a receptores específicos na membrana pós-sináptica, alterando sua permeabilidade iônica e gerando um potencial pós-sináptico. Por fim, o sinal é interrompido por mecanismos de recaptção celular ou degradação enzimática dos neurotransmissores.

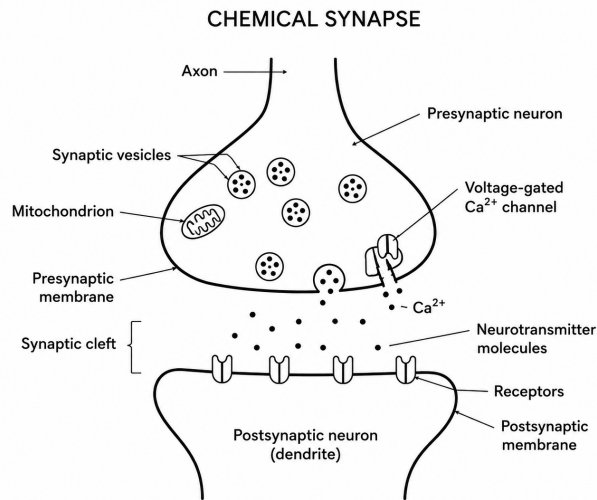


Figura 5: Figura 5: Esquema sobre sinapses químicas

Os receptores que participam da interação podem ser excitatórios ou inibidores. Os excitatórios reduzem temporariamente a diferença de potencial elétrico entre o interior do neurônio e o meio externo. Já os receptores inibitórios exercem o efeito oposto, aumentando essa diferença de potencial. Para que um neurônio consiga gerar um potencial de ação e transmitir o impulso nervoso para outros neurônios, é necessário que ele seja despolarizado até atingir o limiar.

Existem drogas que são capazes de imitar os efeitos dos neurotransmissores nos seus receptores, chamadas agonistas. Há também os antagonistas, que se ligam no lugar das substâncias originais, impedindo sua ação. Alguns exemplos de substâncias agonista são a morfina, e heroína, já de substâncias antagonistas é comum citar a Naloxona e os alucinógenos.

Os principais neurotransmissores no processo da memória são o glutamato, GABA, e dopamina, a noradrenalina, a serotonina e a acetilcolina, moléculas simples. Já quando se trata de moléculas mais complexas, destaca-se os peptídeos, pequeno conjunto de aminoácidos.

Um dos neurotransmissores mais conhecidos são a dopamina, noradrenalina, serotonina e acetilcolina. Nos últimos anos, a imprensa tem popularizado bastante esses nomes, principalmente porque muitos medicamentos usados no tratamento da ansiedade, da depressão e de outras alterações emocionais ou do estado de ânimo atuam modificando a função desses neurotransmissores.

No entanto, ao contrário do que muitas vezes se sugere em matérias jornalísticas, nenhum deles pode ser chamado simplesmente de “transmissor da felicidade”, “do prazer”, “da angústia” ou “da excitação”. Seus efeitos dependem do local onde são liberados, dos receptores sobre os quais atuam e da estrutura cerebral envolvida.

A dopamina, por exemplo, quando age sobre receptores D1 no núcleo accumbens, participa dos mecanismos relacionados à dependência de drogas. Em outras regiões, atuando sobre o mesmo tipo de receptor, pode estar envolvida na atenção; em outras, em certas sensações prazerosas; e, ainda em estruturas como o hipocampo e a amígdala, na formação de memórias e/ou na sua persistência.

6 Circuitos e Redes neurais

Uma célula neural sozinha não é capaz de exercer um processo, mas quando conectadas, essas milhares podem sentir, pensar, lembrar e outras inúmeras funções. Leva-se em conta o fato de que não são órgãos independentes, mas sim processos derivados de uma interconexão de áreas do cérebro, criando assim uma rede. Uma determinada parte do cérebro pode até ter o papel central em determinada função, porém regiões encefálicas específicas não são responsáveis por faculdades mentais específicas.

Através de análises, observa-se um padrão elementar na maneira que os neurônios se conectam, a fim de realizar computações. Esse padrão se repete em escalas muito maiores, mas o menor conjunto de neurônios ligados que produzem uma função, ou seja, o menor desses agrupamentos, se chama de microcircuito canônico.

Somando a isso, um fator essencial para essa teia é a plasticidade sináptica, sendo o reflexo biológico das adaptações e aprendizados biológicos sofridos pela rede. As conexões entre as células nervosas podem ser enfraquecidas baseado nas experiências. Essas modificações podem ser de curta duração ou de longa duração, podendo durar anos ou até a vida inteira (chamada plasticidade hebbiana).

No começo do século XX, o zoólogo alemão Richard Semon (1859-1918) criou o termo "engrama" para definir a base física da memória. Ele defendia que os estímulos externos geram alterações físico-químicas duradouras em grupos de células cerebrais, servindo como o registro material dessas vivências. Além da ideia de assembleias neuronais, teorizadas por Donald Hebb, grupos de neurônios são definidos pela força de suas conexões entre si. Os neurônios individuais podem estar espalhados, porém devem estar intensamente conectado com os outros, além da capacidade de participarem de mais de uma rede ao mesmo tempo.

De maneira simplificada, podemos dizer que essas redes são um conjunto de várias unidades de processamento, neurônios artificiais. Quando interligadas, conseguem ter um comportamento inteligente.

O funcionamento de um neurônio artificial inicia-se com a apresentação dos sinais de entrada. Cada um desses sinais é multiplicado por um peso, que representa o grau de influência de cada entrada sobre a saída da unidade. Em seguida, é realizada a soma ponderada desses valores, gerando um nível de atividade. Por fim, esse nível é comparado ao limiar. Caso o nível de atividade ultrapasse esse limite, o neurônio produz uma resposta de saída; caso contrário, permanece inativo. (Figura 6)

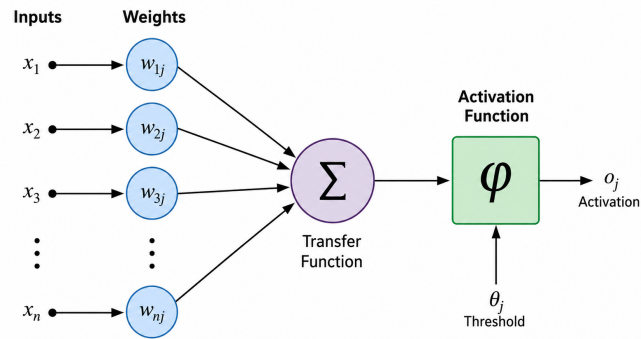


Figura 6: Estrutura de um neurônio artificial. Representação esquemática de um neurônio artificial, ilustrando as entradas, os pesos sinápticos, o somatório, a função de ativação e a saída do modelo computacional. Fonte: Wikimedia Commons. Artificial neuron structure.svg. Disponível em: https://commons.m.wikimedia.org/wiki/File:Artificial_neuron_structure.svg. Acesso em : 13 jul. 2026.

Aspecto	Redes Biológicas	Redes Artificiais
Componentes	Neurônios, dendritos, axônios, sinapses	Nós (unidades), links (pesos)
Tipo de Sinal	Eletroquímico (analógico)	Númerico (computacional)
Aprendizagem	Gradual, adaptativa	Ajuste paramétrico (pesos, backpropagation)
Adaptabilidade	Alta (plasticidade e autorregulação)	Baseada em algoritmos e dados de treino
Velocidade	Relativamente lenta (milissegundos)	Pode ser muito rápida
Escala	Bilhões de neurônios	Tipicamente em milhões ou menos

Figura 7: Tabela comparações redes neurais biológicas e artificiais.

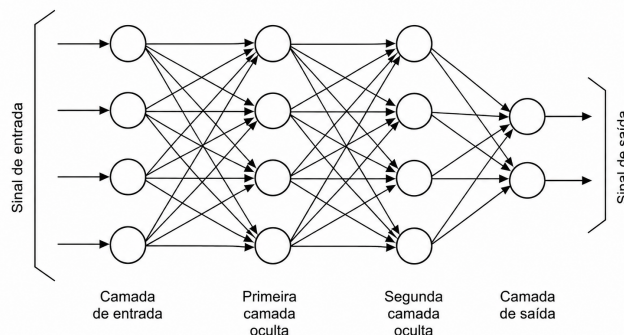


Figura 8: Arquitetura de uma rede neural artificial do tipo perceptron multicamada (MLP). Esquema ilustrando a organização de uma rede neural artificial composta por uma camada de entrada, duas camadas ocultas e uma camada de saída, com conexões totalmente conectadas entre neurônios adjacentes.

7 O que é memória ?

Mesmo sendo uma ideia e palavra usada de forma habitual e por todos os tipos de pessoas, o seu significado pode ser subjetivo e um tanto quanto reflexivo, quando ignoramos o costume e damos uma atenção especial, percebemos o quão extraordinário é a capacidade de lembrarmos, não só de aprendizados, mas de acontecimentos emotivos, sensações físicas, até de questões identitárias.

Porém, em segundo plano, visto através da lente da ciência, a memória é a aquisição, formação, evocação e conservação de informação. Um conjunto de lembranças de cada um determina aquilo que se denomina personalidade ou forma de ser, é o que nos difere como indivíduos.

“Somos aquilo que recordamos” - Norberto Bibbo
(mas também o que resolvemos esquecer)

As memórias são armazenadas nas fendas sinápticas e em redes de neurônios específicas e evocadas pelas mesmas. Elas são fortemente influenciadas a se modular e se estabelecerem pelas emoções, nível de consciência e estado de ânimo. Por exemplo, as redes são fortalecidas em casos de emoções intensas, por isso lembramos com maior facilidade momentos de excessiva alegria ou tristeza.

Com o passar do tempo, vamos esquecendo memórias desnecessárias, porém também incorporamos variações que as enriquecem, as modificam, mesmo que involuntariamente.

Isso ocorre, em partes, pois a memória é uma tradução da realidade em códigos complexos de sinais elétricos e bioquímicos, quando relembramos, precisamos converter novamente a biologia em algo “concreto”, nesses processos ocorrem alterações.

A memória de trabalho é predominantemente processada pelo córtex pré-frontal, assim como memórias em geral, a porção mais anterior do lobo frontal, com destaque para suas regiões ântero-lateral e órbito-frontal. Esse sistema desempenha um papel central na gestão das informações, sendo responsável por explorar e organizar conteúdos relacionados à memória por meio de suas conexões com outras áreas cerebrais. Entre essas conexões, destacam-se as interações com a amígdala basolateral e o hipocampo, mediadas pelo córtex entorrinal. Dessa forma, os processos de exploração da memória conduzidos pelo córtex pré-frontal dependem da comunicação integrada entre essa região, o hipocampo e outras estruturas envolvidas nos mecanismos gerais da memória

7.1 Tipos de Memória e suas diferenças

A memória pode ser classificada em diversas categorias, dependendo do critério adotado. Elas podem ser divididas pelo conteúdo, tempo de duração ou função.

As memórias de fatos e registros, onde conseguimos declarar que existem, são chamadas de declarativas, podendo ser as memórias episódicas, às quais participamos ou assistimos, e as de índole geral as semânticas. As episódicas, são todas autobiográficas, nós sabemos a sua origem. Os conhecimentos comuns, cores, são semânticos. Mesmo que possamos reconhecer a existência ou como as adquirimos, não conhecemos como é definida suas fronteiras, quando o cérebro decide que um episódio começa e outro termina.

O outro tipo de memória que também é classificada a partir do seu conteúdo é a memória de procedimentos. As capacidades motoras e sensoriais, hábitos comuns e ações, como falar, andar, correr, escrever, entre outros. Sendo divididas em implícitas quando não percebe se que estão

sendo adquiridas, enquanto as explícitas tem se consciência e até esforço, dependendo do caso, para formar a memória.

Se organizadas pelo tempo que duram, a maneira mais comum e popular, pode ser dividida em memória curta, longa duração e memória remota. A de curta duração dura até 6h, o tempo necessário para a consolidação das memórias de longo prazo. Quando as memórias de longa duração duram meses ou anos se chamam de memórias remotas.

Ao contrário do senso comum, a memória de curto prazo funciona de forma independente, com dinâmicas e mecanismos próprios, não sendo apenas uma fase inicial da memorização. Já a memória de longo prazo exige tempo para se consolidar, o que a torna altamente vulnerável a interferências e instabilidades nas primeiras horas desse processo

Um exemplo prático dessa separação ficou evidente no caso do paciente K.F. Apesar de apresentar uma lesão grave na memória verbal de curto prazo, suas memórias visual e de longo prazo permaneceram preservadas. Em avaliações médicas, K.F. demonstrou capacidade de reter somente um ou dois dígitos por vez em sua memória de trabalho — um desempenho muito inferior à média humana, que é de sete dígitos. Contudo, ele conseguia adquirir novos vocábulos, recordar fatos e conversar normalmente, mesmo sendo incapaz de reter uma lista numérica simples por poucos segundos.

Essa condição atípica revolucionou os conceitos científicos da época. Até então, o modelo tradicional de Atkinson e Shiffrin propunha uma via única, onde as memórias de curto prazo e de trabalho obrigatoriamente abasteciam a de longo prazo. O caso K.F. provou que ambos os sistemas operam de maneira autônoma, servindo de base para a criação de teorias mais profundas, como o modelo de memória de trabalho.

8 Memória de trabalho

A memória de trabalho é um sistema cognitivo que permite manter informações temporariamente acessíveis e utilizá-las enquanto realizamos alguma tarefa. Manusear e dialogar entre o externo e interno, entre as memórias que já constam nos nossos arquivos e o que vale a pena originar uma nova memória, sem deixar remanescentes. Diferentemente da memória de curto prazo, cuja principal função é apenas armazenar informações por alguns segundos, a memória de trabalho também permite manipular essas informações. Por isso, ela é considerada uma das chamadas funções executivas, conjunto de capacidades mentais responsáveis por organizar o pensamento, controlar a atenção, planejar ações e tomar decisões.

No dia a dia, utilizamos a memória de trabalho o tempo todo. Imagine que alguém lhe diga o caminho para chegar a um museu em uma cidade desconhecida. Enquanto caminha, você precisa manter a sequência de ruas em mente, prestar atenção no trânsito, evitar obstáculos e decidir quando virar à direita ou à esquerda. Se, durante o percurso, você for interrompido por uma distração, talvez já não se lembre exatamente do restante das instruções. Outro exemplo é fazer uma conta de cabeça. Para calcular $37 + 48$, não basta lembrar os números: é preciso somá-los mentalmente, guardar o resultado parcial e utilizá-lo nos passos seguintes. Esses exemplos mostram que a memória de trabalho não apenas conserva informações por um curto período, mas também permite operar sobre elas.

Essa característica distingue a memória de trabalho da memória de curto prazo. Se alguém apenas dita um número de telefone para que ele seja imediatamente discado, basta armazenar a

sequência durante alguns segundos. Porém, se a pessoa disser que o quarto algarismo deve ser substituído por outro antes da ligação, será necessário manter toda a sequência ativa enquanto ela é modificada mentalmente. Nesse caso, a informação está sendo não apenas lembrada, mas também transformada, caracterizando o funcionamento da memória de trabalho.

Os primeiros estudos científicos sobre memória remontam ao final do século XIX, com os experimentos de Hermann Ebbinghaus sobre aprendizagem e esquecimento. Pouco depois, William James distinguiu uma memória responsável pelos conteúdos que permanecem temporariamente na consciência de outra encarregada do armazenamento duradouro. Entretanto, a ideia moderna de memória de trabalho surgiu apenas durante a chamada Revolução Cognitiva, na segunda metade do século XX, quando psicólogos passaram a comparar o funcionamento da mente ao processamento de informações realizado por computadores. Nessa época, George Miller, Eugene Galanter e Karl Pribram propuseram que, para executar um plano de ação, a mente precisava manter temporariamente as informações mais importantes em uma espécie de memória de acesso rápido, que chamaram de *working memory* (memória de trabalho).

Alguns anos depois, Alan Baddeley e Graham Hitch desenvolveram um dos modelos mais influentes para explicar esse sistema. Segundo eles, a memória de trabalho é formada por diferentes componentes especializados. A alça fonológica é responsável por manter informações verbais e sons da fala; o esboço visuoespacial conserva imagens e informações espaciais; e um executivo central coordena a atenção e decide quais informações devem ser mantidas ou manipuladas. Posteriormente, Baddeley acrescentou um quarto componente, o *buffer episódico*, responsável por integrar informações provenientes desses diferentes sistemas e da memória de longo prazo. Esse modelo continua sendo amplamente utilizado na Psicologia Cognitiva.

Ao longo das últimas décadas, outros pesquisadores passaram a defender uma visão diferente. Em vez de considerar a memória de trabalho como um conjunto de compartimentos especializados, propuseram que ela corresponde a um estado temporário de ativação das próprias redes cerebrais que normalmente processam as informações. Assim, quando precisamos manter uma imagem em mente, por exemplo, as áreas visuais do cérebro continuariam temporariamente ativas; quando pensamos em palavras, seriam ativadas principalmente as regiões relacionadas à linguagem. Nessa perspectiva, a memória de trabalho não seria um "lugar" específico onde as informações ficam armazenadas, mas um modo especial de funcionamento de vários sistemas cerebrais distribuídos. Esse debate entre a memória de trabalho como um sistema especializado ("lugar") ou como um estado temporário de ativação ("estado") permanece aberto e constitui um dos principais temas de pesquisa na área atualmente.

Diversos experimentos ajudaram a compreender como a memória de trabalho funciona. Um dos mais conhecidos é o teste de amplitude de dígitos (*digit span*), no qual uma pessoa deve repetir sequências de números apresentadas pelo experimentador. Quando a repetição ocorre na mesma ordem, a tarefa exige principalmente armazenamento temporário; quando a sequência deve ser repetida de trás para frente, torna-se necessário reorganizar mentalmente os números, aumentando a participação da memória de trabalho. Outro paradigma muito utilizado consiste em apresentar rapidamente um conjunto de figuras coloridas e, após alguns segundos, perguntar se uma delas mudou de cor ou de posição. Esses experimentos mostraram que nossa capacidade de manter informações simultaneamente é limitada e depende da atenção.

Modelos computacionais procuram explicar como esses processos poderiam ser realizados pelo cérebro. Alguns modelos assumem que grupos de neurônios permanecem ativos durante todo

o tempo em que uma informação precisa ser lembrada, mantendo-a disponível para uso. Outros sugerem que a informação pode permanecer armazenada temporariamente por mudanças nas conexões entre neurônios, mesmo sem atividade contínua. Embora utilizem abordagens diferentes, esses modelos têm um objetivo comum: compreender como o cérebro consegue manter informações acessíveis, atualizá-las rapidamente e protegê-las contra distrações enquanto realizamos tarefas complexas.

Hoje se sabe que a memória de trabalho desempenha um papel central em praticamente todas as atividades intelectuais. Ela participa da compreensão da linguagem, da leitura, da resolução de problemas matemáticos, do planejamento de ações, da aprendizagem e da tomada de decisões. Além disso, diferenças individuais em sua capacidade estão relacionadas ao desempenho escolar, ao raciocínio lógico e à inteligência fluida, e alterações em seu funcionamento são observadas em diversos transtornos neurológicos e psiquiátricos, como o transtorno do déficit de atenção e hiperatividade (TDAH), a doença de Alzheimer e a esquizofrenia. Por essa razão, a memória de trabalho tornou-se um dos temas mais estudados da Psicologia Cognitiva e da Neurociência nas últimas décadas.

9 Modelos

A dificuldade presente no contexto da neurociência, permite a variação do meio de estudo, surgindo a modelagem teórica. A ideia central baseia-se em traduzir o foco da pesquisa em modelos em linguagem matemática. Surge assim experimentos *in silico*, revolucionando o método científico através dos computadores, onde o *in silico* se trata de experimentos realizados via simulações de modelos matemáticos de sistemas biológicos em um computador.

Um modelo simplifica os fenômenos intencionalmente, mantendo apenas as características essenciais para explicar o comportamento do sistema. A fim de facilitar a compreensão natural dos processos e conecta as suposições teóricas com os dados obtidos nos testes práticos. Além disso, a metodologia une informações vindas de múltiplos níveis, como molecular, celular e sistêmico, o que permite esclarecer novos comportamentos que foram previstos pelo modelo ou notados após a sua criação.

Os modelos computacionais empregados na neurociência podem ser classificados em três categorias principais. Os modelos descritivos têm como objetivo representar e organizar dados experimentais de forma quantitativa, descrevendo o comportamento de neurônios e circuitos sem necessariamente explicar os mecanismos envolvidos. Os modelos mecanísticos buscam compreender como estruturas neurais, conexões sinápticas e processos fisiológicos dão origem às funções cognitivas, incluindo a memória de trabalho. Já os modelos interpretativos (ou normativos) utilizam princípios teóricos, como teoria da informação e otimização, para investigar por que o sistema nervoso processa informações de determinada maneira. Em conjunto, essas abordagens oferecem diferentes perspectivas para compreender a organização e o funcionamento dos sistemas neurais, servindo como base para o desenvolvimento de modelos específicos de memória de trabalho.

Dentre os modelos computacionais desenvolvidos para explicar a memória de trabalho, destacam-se aqueles que descrevem os mecanismos responsáveis pela manutenção e manipulação temporária das informações. Esses modelos diferem quanto ao nível de detalhamento, abrangendo desde formulações matemáticas mais abstratas até simulações de redes neurais biologicamente plausíveis. De modo geral, as principais abordagens podem ser agrupadas em modelos de ati-

vidade persistente, modelos baseados em redes neurais recorrentes e modelos fundamentados na plasticidade sináptica.

Os modelos de atividade persistente partem da hipótese de que as informações permanecem ativas na memória de trabalho devido à manutenção contínua da atividade elétrica de grupos de neurônios durante o intervalo em que o estímulo já não está presente. Nesse contexto, conjuntos de neurônios continuam disparando de forma sustentada, preservando a representação da informação até que ela deixe de ser necessária. Esse comportamento é possibilitado principalmente pela presença de conexões recorrentes entre os neurônios, que permitem a retroalimentação da atividade neural e impedem que o sinal desapareça rapidamente.

As redes neurais recorrentes constituem uma das principais implementações computacionais dessa hipótese. Diferentemente das redes neurais convencionais, elas possuem conexões de realimentação que permitem que informações produzidas em instantes anteriores influenciem o processamento atual. Essa característica torna essas redes especialmente adequadas para representar processos cognitivos que dependem da manutenção temporal de informações, como a memória de trabalho. Além de armazenar representações ao longo do tempo, esses modelos conseguem reproduzir diferentes padrões de atividade observados experimentalmente em circuitos corticais, contribuindo para a compreensão dos mecanismos neurais envolvidos nesse processo.

Embora os modelos baseados em atividade persistente expliquem diversos aspectos da memória de trabalho, evidências experimentais mais recentes sugerem que a manutenção das informações nem sempre depende de disparos contínuos dos neurônios. Como alternativa, foram propostos modelos baseados na plasticidade sináptica, nos quais as informações podem permanecer armazenadas por meio de alterações temporárias na intensidade das conexões entre neurônios. Nessa abordagem, mudanças rápidas na eficácia sináptica permitem conservar as representações mesmo durante períodos de baixa atividade elétrica, reduzindo o consumo energético do sistema nervoso e oferecendo uma explicação complementar para os mecanismos de armazenamento temporário das informações.

Esses diferentes modelos não são necessariamente excludentes. Atualmente, muitos estudos sugerem que a memória de trabalho resulta da interação entre atividade neural persistente, circuitos recorrentes e modificações transitórias nas conexões sinápticas, permitindo explicar de forma mais abrangente a flexibilidade e a capacidade limitada desse sistema cognitivo.

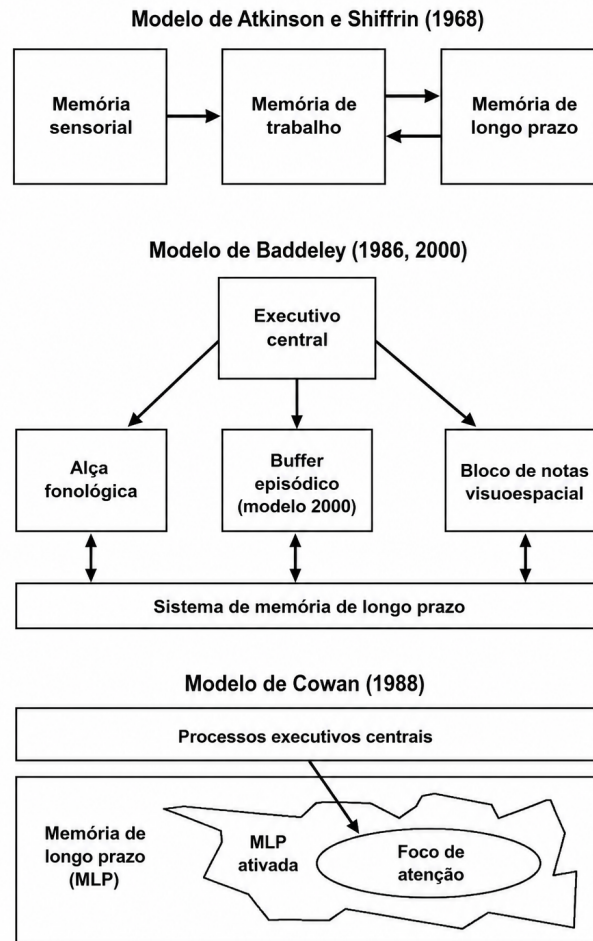


Figura 9: Modelos teóricos da memória de trabalho. Representação esquemática dos modelos de memória propostos por Atkinson e Shiffrin (1968), Baddeley (1986; 2000) e Cowan (1988), evidenciando as principais estruturas e o fluxo de processamento das informações em cada abordagem. Fonte: Elaboração própria, com base em Ricker, AuBuchon e Cowan (2010).

10 Doenças ligadas a memória de trabalho

Muitas doenças neurodegenerativas estão relacionadas a falhas na memória de trabalho, impedindo funções do dia a dia. Por exemplo, ela desempenha um papel fundamental no ajuste fino do comportamento em tempo real. Quando há comprometimento desse sistema, torna-se difícil, ou mesmo inviável, avaliar adequadamente a relevância dos estímulos que ocorrem continuamente. Como consequência, a própria percepção da realidade pode ser significativamente prejudicada.

Na esquizofrenia, observa-se um comprometimento relevante da memória de trabalho. O indivíduo pode apresentar dificuldades em interpretar corretamente o ambiente ao seu redor. Por exemplo, ao entrar em um espaço movimentado, onde diversas pessoas conversam, caminham e mudam de posição, o paciente pode não conseguir organizar essas informações de forma coerente. Em vez de perceber indivíduos distintos, com ações e falas separadas, pode interpretar a cena como

um conjunto desorganizado, ameaçador ou desprovido de sentido. Nessa situação, há prejuízo na discriminação de memórias simultâneas ou sucessivas relacionadas às pessoas, aos gestos, às vozes e aos movimentos percebidos.

Diversos autores contemporâneos, como Weinberger e Danion, apontam que o caráter alucinatório da realidade vivenciada por indivíduos com esquizofrenia pode estar associado a déficits na memória de trabalho. O processamento dessas memórias de maneira inadequada, conferindo-lhes um caráter potencialmente alucinatório.

Outro transtorno afetado é o TDAH (Transtorno de déficit de atenção e hiperatividade). Enquanto grande parcela da sociedade trata a condição neurológica como um problema de memória, estudos apontam que entre 75% e 81% das crianças com TDAH apresentavam graves dificuldades com a memória de trabalho, e não na memória de curto prazo como se imagina.

Esses déficits demonstram a importância da memória de trabalho para diversas funções executivas e justificam o interesse crescente no desenvolvimento de modelos computacionais capazes de compreender esses transtornos.

11 Conclusão

A memória de trabalho representa um dos processos cognitivos mais importantes para o funcionamento humano, pois permite manter e manipular informações temporariamente durante a realização de tarefas, tornando possível o raciocínio, a aprendizagem, a linguagem, a tomada de decisões e o planejamento de ações. Ao longo deste trabalho, observou-se que esse sistema não depende de uma única estrutura cerebral, mas da interação dinâmica entre diferentes regiões do encéfalo, circuitos neurais e mecanismos celulares, evidenciando a complexidade dos processos envolvidos na cognição.

Sob a perspectiva da Neurociência Computacional, os modelos matemáticos e computacionais constituem ferramentas fundamentais para investigar esses mecanismos, permitindo representar, testar e comparar hipóteses sobre o funcionamento da memória de trabalho. Modelos baseados em atividade persistente, redes neurais recorrentes e plasticidade sináptica oferecem diferentes interpretações para a manutenção temporária das informações, sendo atualmente considerados abordagens complementares, e não necessariamente excludentes. A integração dessas diferentes propostas tem contribuído para uma compreensão mais abrangente do processamento cognitivo e do funcionamento dos circuitos neurais.

Além de ampliar o conhecimento sobre os mecanismos biológicos da memória, esses modelos apresentam importantes aplicações clínicas. A compreensão mais detalhada da memória de trabalho auxilia na investigação de alterações observadas em transtornos neurológicos e psiquiátricos, como esquizofrenia, transtorno do déficit de atenção e hiperatividade (TDAH) e doença de Alzheimer, favorecendo o desenvolvimento de estratégias diagnósticas mais precisas e de novas abordagens terapêuticas voltadas à reabilitação cognitiva.

Por fim, as perspectivas futuras apontam para uma integração cada vez maior entre Neurociência Computacional, inteligência artificial, técnicas de neuroimagem e grandes modelos computacionais do cérebro. O desenvolvimento de modelos capazes de representar simultaneamente diferentes níveis de organização do sistema nervoso — do funcionamento sináptico às redes cerebrais — poderá ampliar significativamente a compreensão da memória de trabalho e de sua relação com outros processos cognitivos.

Compreender a memória de trabalho vai muito além de explicar como conseguimos lembrar uma informação por alguns segundos. Significa buscar entender um dos processos que tornam possíveis o pensamento, a aprendizagem, o planejamento e a tomada de decisões, capacidades que fazem parte da experiência humana. Nesse contexto, a Neurociência Computacional estabelece uma ponte entre a biologia, a matemática e a computação, oferecendo novas formas de investigar o funcionamento do cérebro. À medida que essa área avança, amplia-se também nossa capacidade de compreender um dos sistemas mais complexos da natureza e de transformar esse conhecimento em benefícios para a ciência, a medicina e a sociedade.

Referências

- [1] BRAITHWAITE, Lauren. **Working Memory**. The Decision Lab, [2026]. Disponível em: <https://thedecisionlab.com/reference-guide/psychology/working-memory>. Acesso em: 2 jul. 2026.
- [2] KANDEL, Eric R. et al. **Princípios de neurociências**. 5. ed. Porto Alegre: Artmed, 2014.
- [3] IZQUIERDO, Iván. **Memória**. 2. ed. Porto Alegre: Artmed, 2011.
- [4] POSTLE, Bradley R.; OBERAUER, Klaus. Working Memory: Theoretical, Computational, and Neural Considerations. In: KAHANA, Michael J.; WAGNER, Anthony D. (org.). **The Oxford Handbook of Human Memory**: Volume 1: Foundations. Oxford: Oxford University Press, 2024.
- [5] ROQUE, Antonio. **Apresentação da Neurociência Computacional**. Ribeirão Preto: Universidade de São Paulo, 2025.
- [6] ROQUE, Antonio. **Elementos Básicos de Neurociência**. Ribeirão Preto: Universidade de São Paulo, 2025. Notas de aula.
- [7] ROQUE, Antônio. **Potenciais de Membrana e de Ação**. Ribeirão Preto: Universidade de São Paulo, 2024.
- [8] ROQUE, Antônio. **Equação da Membrana**. Ribeirão Preto: Universidade de São Paulo, 2024. Notas de aula.
- [9] BHAT, Adithya. **Day 43: Introduction to Neural Networks — Biological vs. Artificial Networks**. Medium, 2025. Disponível em: <https://medium.com/@bhatadithya54764118/day-43-introduction-to-neural-networks--biological-vs-artificial-networks-b8cd40d7df7d>. Acesso em: 25 jun. 2026.
- [10] CARVALHO, André de. **Redes Neurais Artificiais**. São Carlos: ICMC-USP, [20–]. Disponível em: <https://sites.icmc.usp.br/andre/research/neural/>. Acesso em: 22 jun. 2026.



GATOS INSTÁVEIS

Novas fronteiras da radioterapia: radiogenômica e
radiômica na predição de perfis moleculares em
metástases cerebrais de câncer de mama

Larissa Ribeiro do Amaral

Orientadora: Profa. Dra. Juliana Fernandes Pavoni
Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da
Universidade de São Paulo

2026



ESCOLA DE TALENTOS DO INSTITUTO PRINCIPIA
TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

Larissa Ribeiro do Amaral

**Novas Fronteiras da Radioterapia:
Radiogenômica e Radiômica na Predição
de Perfis Moleculares em Metástases
Cerebrais de Câncer de Mama**

Orientadora:

Prof. Dra. Juliana Fernandes Pavoni

Coorientadores:

Bela. Laiane Simões Mioto

Bel. Victor Hugo Vasconcellos Nogueira Silva

SÃO PAULO – SP

Julho de 2026

Novas Fronteiras da Radioterapia: Radiogenômica e Radiômica na Predição de Perfis Moleculares em Metástases Cerebrais de Câncer de Mama

Larissa Ribeiro do Amaral¹, Victor Hugo V. Nogueira Silva², Evandro Molinari², Laiane Simões Miotto², Juliana Fernandes Pavoni²

¹ Escola de Talentos – Instituto Principia, Rua Pamplona, 145, São Paulo - SP

² Universidade de São Paulo, Av. Bandeirantes, 3900, Ribeirão Preto - SP

AGRADECIMENTOS

A conclusão deste trabalho não representa apenas o fim de um ciclo acadêmico, mas o ápice de uma jornada transformadora e profundamente humana. Nenhuma grande conquista é feita de forma solitária, e este TCC carrega um pedaço de cada pessoa que acreditou em mim ao longo do caminho.

Primeiramente, expresso minha mais profunda gratidão à minha orientadora, Profa. Dra. Juliana Fernandes Pavoni. Obrigada por me guiar com tanta sabedoria, por iluminar os caminhos da pesquisa e por me inspirar a buscar sempre a excelência. Aos meus coorientadores, Laiane Simões Miotto, Evandro Molinari e Victor Hugo Vasconcellos, meu muito obrigada por todo o suporte técnico, pelas incansáveis revisões, pelas discussões enriquecedoras e por segurem a minha mão nos momentos de maior desafio metodológico. Vocês foram essenciais.

À Escola de Talentos do Instituto Principia, que foi um verdadeiro divisor de águas na minha vida. Agradeço imensamente ao nosso Diretor e Tutor Prof. Dr. Ricardo D'Elia Matheus e ao Presidente do Grupo de Patronos Prof. Dr. Marcelo Moraes Guzzo, por sonhar e sustentar este projeto que transforma vidas. Aos meus queridos Tutores, Prof. Dr. André Paschoal e Prof. Dr. Leonardo de Lima, obrigada por cada conselho, por abrirem portas para o conhecimento e por nos ensinarem a pensar como verdadeiros cientistas. Ao nosso Secretário, Welington Barbosa de Souza, meu agradecimento especial por toda a paciência, organização e por sempre nos ajudar com um sorriso no rosto.

Aos meus pais, familiares e amigos que são o meu alicerce. Obrigada por compreenderem as minhas ausências, por vibrarem com as minhas pequenas vitórias e por me darem o amor e a estrutura necessários para que eu pudesse voar.

E, por fim, à minha inesquecível Turma 2024 - Gatos Instáveis: Arthur Queiroz Araújo, Cecília Cristina Cavalcanti dos Santos, Eduardo Henrique Fabiane, Filipe Campos Ribeiro, Iara Paulone Gonçalves, Isabella Stimer Eberhardt, Liabilih Angela Ribas Schoemberger, Manuella Oliveira Rodrigues, Melissa Katerberg Zanatta, Rafael Alcantra Cabrera e Rafael Araújo de Oliveira. Vocês foram a melhor parte dessa trajetória.

Dentro dessa turma incrível, deixo o meu abraço mais apertado aos meus parceiros de TCC, Filipe Campos Ribeiro, Liabilih Angela Ribas Schoemberger e Rafael Alcantra Cabrera. Obrigada por dividirem o peso desse trabalho comigo, pelas madrugadas de estudo, pelas angústias compartilhadas e pelas comemorações conjuntas. Nós conseguimos!

E, claro, um agradecimento cheio de amor às minhas eternas Ricarditas Girls: Isabella, Melissa, Manuella, Cecília e Iara. Obrigada por serem o meu porto seguro, pelas risadas nos momentos de tensão e por nunca, em nenhum momento sequer, me deixarem não sorrir. Vocês fizeram tudo valer a pena.

A todos vocês, a minha eterna gratidão e o meu coração. Muito obrigada!

Resumo

A radioterapia é uma modalidade essencial no tratamento oncológico, porém a resposta clínica varia significativamente entre os pacientes devido à heterogeneidade tumoral. A radiômica e a radiogenômica despontam como ferramentas promissoras para a oncologia de precisão, permitindo a extração de dados quantitativos de imagens médicas para inferir perfis biológicos de forma não invasiva.

Este estudo objetivou avaliar modelos supervisionados de aprendizado de máquina na predição dos subtipos moleculares do câncer de mama (HER2, *Triple Negative* e *Triple Positive*) a partir de características radiômicas extraídas de imagens de metástases cerebrais. Trata-se de um estudo retrospectivo e computacional que utilizou três conjuntos de dados independentes, compostos por 48 amostras cada. A metodologia incluiu a extração de características de textura e a aplicação da regressão LASSO (*Least Absolute Shrinkage and Selection Operator*) para a seleção das variáveis mais relevantes e redução da dimensionalidade. Os modelos *Random Forest* (RF), *Gradient Boosting* (GB), *Support Vector Machine* (SVM) e Regressão Logística (LR) foram treinados utilizando cinco variáveis radiômicas e uma variável clínica (número de lesões).

O desempenho preditivo foi avaliado por meio de validação cruzada estratificada, utilizando as métricas AUC, Acurácia, F1-Score e *Matthews Correlation Coefficient* (MCC). Os resultados demonstraram que o algoritmo RF obteve o melhor desempenho na classificação dos subtipos HER2 (AUC = 0,748; MCC = 0,369) e Triple Positive (AUC = 0,709; MCC = 0,270), comprovando sua robustez ao superar o desbalanceamento severo deste último conjunto. Para o subtipo Triple Negative, a análise das matrizes de confusão revelou que o GB apresentou o desempenho clinicamente mais seguro e equilibrado (AUC = 0,715; MCC = 0,294), minimizando a ocorrência de falsos negativos na detecção desta classe agressiva. Conclui-se que a integração entre radiômica e inteligência artificial possui alto potencial preditivo. Essa abordagem não invasiva permite inferir o perfil biológico tumoral com precisão, oferecendo suporte valioso para a tomada de decisão clínica e a individualização do planejamento radioterápico.

Palavras-chave: Radioterapia; Radiômica; Radiogenômica; Câncer de Mama; Metástase Cerebral; Machine Learning.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	2
2	OBJETIVO	5
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	6
3.1	RADIOGENÔMICA	6
3.2	RADIÔMICA	6
3.3	APRENDIZADO DE MÁQUINA	8
3.3.1	<i>RANDOM FOREST</i>	8
3.3.2	<i>LOGISTIC REGRESSION</i>	9
3.3.3	<i>GRADIENT BOOSTING</i>	10
3.4	CÂNCER DE MAMA E METÁSTASE CEREBRAL	10
4	METODOLOGIA	12
4.1	DESENHO DO ESTUDO E CARACTERIZAÇÃO DA CASUÍSTICA	12
4.2	VARIÁVEIS UTILIZADAS E REDUÇÃO DE DIMENSIONALIDADE	13
4.2.1	<i>INTERPRETAÇÃO DAS CARACTERÍSTICAS SELECIONADAS</i>	14
4.3	DESCRIÇÃO METODOLÓGICA E CONFIGURAÇÃO DOS MODELOS	15
4.4	VALIDAÇÃO CRUZADA	15
4.5	MÉTRICAS DE AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO	16
4.5.1	<i>AUC (AREA UNDER THE ROC CURVE)</i>	17
4.5.2	<i>CA (CLASSIFICATION ACCURACY)</i>	17
4.5.3	<i>F1-SCORE</i>	18
4.5.4	<i>MCC (MATTHEWS CORRELATION COEFFICIENT)</i>	18
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	19
5.1	FLUXOGRAMA DE ANÁLISE E DESEMPENHO GERAL DOS MODELOS	19
5.2	INTERPRETAÇÃO DAS AUCS E ANÁLISE POR SUBTIPO MOLECULAR	21
5.3	DESBALANCEAMENTO DO TRIPLE POSITIVE	24
5.4	DIFERENÇAS ENTRE OS SUBTIPOS (HER2, TN E TP)	25
5.5	IMPORTÂNCIA DAS <i>FEATURES</i> RADIÔMICAS	25
5.6	LIMITAÇÕES DO ESTUDO	26
5.7	PERSPECTIVAS FUTURAS E APLICAÇÃO CLÍNICA	26
6	CONCLUSÃO	26

1 INTRODUÇÃO

A radioterapia é uma das principais modalidades utilizadas no tratamento do câncer e ocupa um lugar de grande importância na oncologia moderna. De forma geral, esse tipo de tratamento utiliza a radiação ionizante para atingir as células tumorais, provocando danos no seu material genético e dificultando sua capacidade de crescer e se multiplicar [1, 2]. O efeito da radioterapia ocorre porque a radiação interfere diretamente no DNA das células, causando lesões que, em muitos casos, impedem que elas continuem se dividindo normalmente [1, 2, 3]. Como as células cancerígenas costumam se multiplicar de maneira descontrolada e apresentam maior vulnerabilidade a esse tipo de dano, a radioterapia se torna uma estratégia eficaz para controlar o tumor e reduzir sua progressão [1, 2, 3]. Por essa razão, ela pode ser usada sozinha ou associada a outras formas de tratamento, como cirurgia e quimioterapia, dependendo das características do caso e do estágio da doença [1, 2, 3].

Quando a radiação atinge a área do tumor, ela não consegue agir exclusivamente sobre as células doentes e os tecidos saudáveis próximos também podem ser afetados [2, 3, 4]. Para controlar o dano induzido no tecido saudável, durante o planejamento do tratamento radioterápico, a distribuição de dose a ser entregue ao paciente é ajustada de maneira a entregar a dose prescrita ao paciente, respeitando as doses de tolerância conhecidas para o tecido saudável ao redor. O corpo reage ao dano causado pela radiação por meio de mecanismos de reparo celular, inflamação e regeneração dos tecidos [2, 3, 4]. Em situações em que os danos são pequenos, o organismo consegue se recuperar com maior facilidade [2, 3, 4]. Porém, quando a dose é mais elevada ou o tecido irradiado é mais sensível, podem surgir efeitos colaterais, como, por exemplo, vermelhidão na pele, irritação, inflamações, mucosite e, em alguns casos, alterações mais duradouras nos tecidos [2, 3, 4]. Isso mostra que, embora a radioterapia seja uma ferramenta importante no combate ao câncer, ela também apresenta consequências que precisam ser consideradas no planejamento do tratamento [2, 3, 4].

Outro ponto essencial para compreender a radioterapia é entender por que ela funciona e como ela provoca esses efeitos no organismo. A radiação ionizante tem energia suficiente para romper ligações químicas e gerar alterações moleculares nas células [1, 3, 4]. Além do dano direto ao DNA, ela também pode produzir radicais livres, principalmente por meio da interação com a água presente no interior das células [1, 3, 4]. Esses radicais livres aumentam o estresse celular e ampliam os prejuízos provocados pela radiação [1, 3, 4]. Quando esse dano é muito intenso, a célula perde sua capacidade de sobreviver e pode entrar em morte celular [1, 3, 4]. No caso dos tumores, isso é desejável, porque significa reduzir ou eliminar a população de células malignas, no entanto, como os tecidos normais também possuem células que se dividem e se renovam, eles igualmente podem sofrer consequências do tratamento, o que explica os efeitos adversos observados durante ou após a radioterapia [2, 3, 4]. Assim, o sucesso do tratamento depende do equilíbrio entre destruir o tumor e preservar, ao máximo, os tecidos saudáveis [1, 2, 3, 4].

Apesar de sua eficácia comprovada, a radioterapia não age da mesma forma em todos os pacientes. Isso acontece porque o organismo humano responde de maneira diferente à radiação, e essa resposta depende de diversos fatores biológicos, clínicos e genéticos [2, 3, 4].

É justamente diante dessa variação na resposta ao tratamento que surge a radiogenômica como uma área de grande interesse científico, a qual busca compreender a relação entre as características genéticas de cada indivíduo e a forma como seu organismo responde à radioterapia [4, 5, 6]. Em outras palavras, a radiogenômica investiga como variações no material genético podem influenciar tanto a sensibilidade das células tumorais à radiação quanto a intensidade dos efeitos colaterais nos tecidos normais [4, 5, 6]. Essa área parte da ideia de que nem todos os pacientes reagem da mesma forma ao mesmo tratamento, porque cada organismo possui particularidades biológicas que interferem nos mecanismos de reparo do DNA, na resposta inflamatória e na tolerância à radiação [4, 5, 6]. A partir desse conhecimento, torna-se possível pensar em abordagens mais personalizadas, nas quais o tratamento seja planejado de acordo com o perfil genético do paciente [4, 5, 6].

A importância da radiogenômica está exatamente nessa possibilidade de tornar a radioterapia mais segura, precisa e individualizada [4, 5, 6]. Ao identificar marcadores genéticos associados à radiosensibilidade e à toxicidade, essa área contribui para prever quais pacientes terão melhor resposta ao tratamento e quais apresentam maior risco de complicações [4, 5, 6]. Isso abre caminho para decisões clínicas mais bem fundamentadas, permitindo ajustar doses, escolher estratégias terapêuticas mais adequadas e reduzir a chance de efeitos colaterais desnecessários [4, 5, 6].

Dessa forma, a radiogenômica representa um avanço importante dentro da oncologia, pois une o conhecimento da biologia molecular com a prática clínica, favorecendo uma medicina mais personalizada [4, 5, 6]. Em vez de considerar apenas o tipo de tumor, essa abordagem também leva em conta a resposta biológica do paciente, o que pode aumentar a eficácia terapêutica e melhorar a qualidade de vida durante o tratamento [4, 5, 6].

A relação entre radioterapia e radiogenômica mostra como a oncologia vem avançando em direção a tratamentos mais individualizados [4, 5, 6]. A radioterapia continua sendo uma ferramenta essencial no controle do câncer, mas seus efeitos variáveis evidenciam a necessidade de novas formas de avaliação e planejamento [2, 3, 4]. Entretanto, a radiogenômica surge exatamente para responder a essa necessidade, oferecendo uma base científica para compreender melhor por que alguns pacientes toleram melhor a radiação enquanto outros desenvolvem toxicidades mais intensas [4, 5, 6].

Neste contexto, vale destacar uma ferramenta que permite a obtenção de informações genéticas individuais de maneira não invasiva, a radiômica. A radiômica, utiliza imagens médicas - como tomografias computadorizadas (CT, do inglês *Computed Tomography*), ressonâncias magnéticas (RM) e PET/CT - para extrair grande quantidade de características quantitativas capazes de descrever textura, forma, heterogeneidade e propriedades internas dos tumores e dos tecidos normais [7, 8]. Essas características, muitas vezes imperceptíveis ao olhar humano,

permitem transformar imagens em conjuntos de dados matematicamente analisáveis, que indiretamente podem representar características específicas do paciente, ampliando a capacidade de prever desfechos clínicos e compreender melhor o comportamento tumoral [7, 8, 9]. Portanto, a radiômica pode ser entendida como um óculos que permite enxergar mais detalhes e conjuntos de informações que o olho humano sozinho não consegue, criando uma ponte entre a imagem médica e a análise computacional avançada.

A partir da integração entre radiômica e dados genéticos, surge a radiogenômica como uma evolução natural, permitindo correlacionar padrões identificados nas imagens com variantes genéticas específicas [4, 5, 6, 9]. Essa união de informações amplia significativamente o potencial de prever radiosensibilidade, toxicidade e resposta ao tratamento, fortalecendo o movimento em direção à radioterapia personalizada [4, 5, 6].

Com o grande volume de dados gerados pela radiômica e pela genômica, a utilização de técnicas de Inteligência Artificial (IA), especialmente de aprendizado de máquina (*machine learning*), torna-se indispensável para a análise e interpretação eficientes dessas informações [10]. A IA oferece ferramentas capazes de processar conjuntos de dados complexos e de alta dimensionalidade, extraíndo informações que frequentemente não são perceptíveis por métodos estatísticos convencionais. O aprendizado de máquina inclui algoritmos capazes de identificar padrões complexos, classificar amostras, selecionar variáveis importantes e realizar previsões clínicas com maior precisão [10]. Entre esses algoritmos, destaca-se o *Random Forest*, baseado na construção de múltiplas árvores de decisão treinadas a partir de subconjuntos aleatórios dos dados, combinando seus resultados para melhorar a estabilidade e a acurácia do modelo [11]. Esse método é amplamente utilizado em estudos radiômicos e radiogenômicos por lidar bem com alta dimensionalidade e pequenas amostras, características típicas desses conjuntos de dados [11].

Nesse cenário, o câncer de mama surge como uma neoplasia de grande relevância para a aplicação dessas tecnologias, especialmente devido à necessidade de estratégias terapêuticas mais individualizadas e à variabilidade molecular observada entre as pacientes. O câncer de mama é uma das neoplasias mais incidentes na população feminina e apresenta marcante heterogeneidade biológica, sendo classificado em subtipos moleculares com base na expressão dos receptores hormonais de estrogênio (ER, *Estrogen Receptor*) e progesterona (PR, *Progesterone Receptor*), além do marcador do receptor do fator de crescimento epidérmico humano 2 (HER2, *Human Epidermal Growth Factor Receptor 2*) [12, 13, 14]. Esses subtipos influenciam diretamente o comportamento do tumor, sua agressividade, seu padrão de resposta ao tratamento e o prognóstico das pacientes [12, 13].

Em estágios mais avançados da doença, é frequente o desenvolvimento de metástases, e o cérebro está entre os principais sítios acometidos, representando um desafio clínico devido à complexidade anatômica e às limitações terapêuticas próprias do sistema nervoso central [12, 15]. As metástases cerebrais decorrentes do câncer de mama mantêm, ao menos parcialmente, características biológicas do tumor primário, o que significa que sua organização estrutural,

padrão de crescimento e heterogeneidade permanecem influenciados pelo subtipo molecular de origem [12, 14, 15].

Tais características estruturais, que antes eram identificadas apenas por biópsia, agora podem ser inferidas pela união entre exames de imagem avançados, como a ressonância magnética [12, 13, 15], e a extração de dados quantitativos impulsionada por IA. Todavia, a radiômica destaca-se por permitir a extração de propriedades das imagens, como textura, forma e distribuição de intensidades, traduzindo aspectos visuais em dados numéricos de alta dimensionalidade [7, 8, 9]. Quando estes dados são associados a informações biológicas conhecidas - como os status de ER, PR e HER2 - estabelece-se a base da radiogenômica, que busca correlacionar padrões de imagem a características moleculares do tumor [4, 5, 6, 9]. Essa integração possui grande potencial clínico, sobretudo em casos de metástases cerebrais, nas quais a realização de biópsias invasivas pode ser limitada, arriscadas ou não representar adequadamente toda a heterogeneidade tumoral [14, 15].

Ao combinar radiômica, radiogenômica e técnicas de aprendizado de máquina, torna-se possível investigar se características extraídas das imagens de metástases cerebrais podem prever o subtipo biológico do tumor de mama primário [10, 11, 12]. Algoritmos utilizados em estudos radiômicos são capazes de identificar padrões complexos e selecionar variáveis relevantes a partir de conjuntos de dados extensos e heterogêneos [11, 12]. Assim, essa abordagem não invasiva pode auxiliar no refinamento do diagnóstico, no planejamento terapêutico e na estimativa de resposta à radioterapia, especialmente considerando que diferentes subtipos tumorais podem apresentar sensibilidades distintas à radiação [13, 15]. Dessa forma, a inclusão do câncer de mama e suas metástases cerebrais amplia o campo de aplicação da radiogenômica, fortalecendo seu papel como ferramenta estratégica no desenvolvimento de tratamentos mais personalizados e seguros.

2 OBJETIVO

Avaliar modelos supervisionados de aprendizado de máquina para predição dos subtipos moleculares das metástases cerebrais de câncer de mama a partir de características radiômicas extraídas de imagens, explorando o potencial da radiômica como ferramenta auxiliar na medicina personalizada, na caracterização tumoral e na individualização de estratégias terapêuticas em radio-oncologia. O estudo propõe utilizar *features* radiômicas morfológicas associadas a um rigoroso tratamento da estrutura multilesional como abordagem metodológica inovadora para caracterização biológica tumoral e suporte à tomada de decisão clínica.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

3.1 RADIOGENÔMICA

A radiogenômica é um campo interdisciplinar que investiga como variações genéticas individuais influenciam a resposta biológica à radiação ionizante, tanto em termos de controle tumoral quanto de toxicidade em tecidos normais. A premissa central consiste em compreender de que forma as diferenças nos mecanismos de reparo do DNA, estabilidade genômica, vias inflamatórias e processos celulares podem explicar por que pacientes submetidos ao mesmo regime de radioterapia apresentam efeitos clínicos distintos [4, 5, 6]. A literatura descreve que variantes em genes associados ao reparo de quebras de dupla fita, como ATM, BRCA1 e XRCC1, podem alterar a sensibilidade do paciente ao tratamento, aumentando o risco de efeitos adversos ou reduzindo a eficácia terapêutica [4, 6]. Estudos recentes demonstram que, ao mapear essas características genéticas, torna-se possível desenvolver modelos capazes de prever radiosensibilidade e toxicidade tardia, permitindo ajustar a dose de radiação de modo mais seguro [5]. Nesse sentido, a radiogenômica alinha-se aos princípios da medicina personalizada ao integrar biologia molecular, tecnologia de dados e prática clínica, oferecendo uma abordagem promissora para otimizar resultados terapêuticos e minimizar efeitos colaterais.

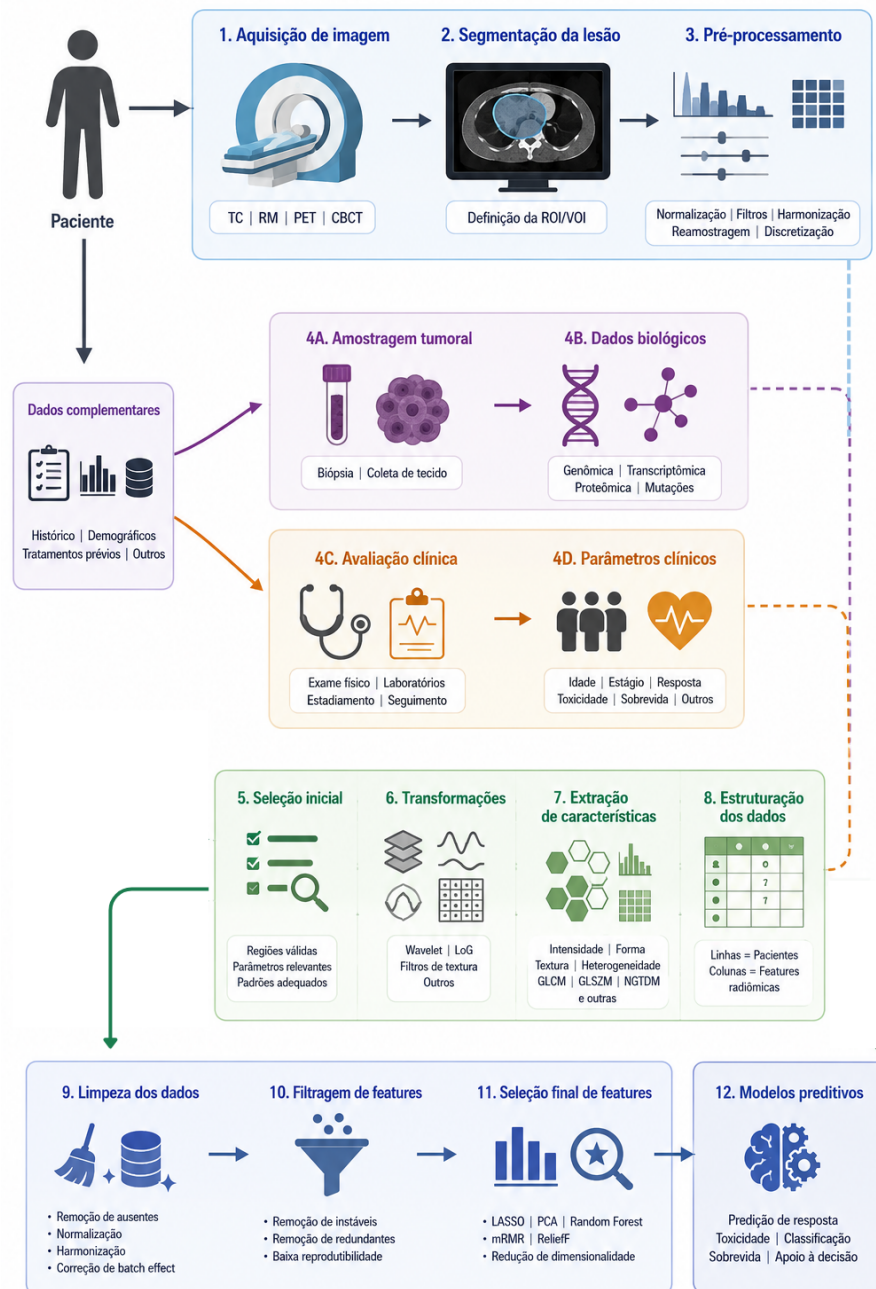
3.2 RADIÔMICA

A radiômica consiste na extração de atributos quantitativos a partir de imagens médicas, como tomografias computadorizadas, ressonâncias magnéticas e exames PET, gerando milhares de variáveis relacionadas à forma, intensidade, textura e heterogeneidade tumoral [7, 8]. Essas características, frequentemente imperceptíveis à avaliação visual convencional, fornecem informações profundas sobre a arquitetura interna do tumor, seu microambiente e seu comportamento biológico [7]. A aplicação da radiômica para desenvolvimento de modelos preditivos com IA segue um processo estruturado composto por etapas como aquisição padronizada das imagens, segmentação do volume tumoral, extração dos descritores e análise estatística ou computacional [7, 8, 9]. Um fluxograma para compreender esse processo é representado na Figura 3.1.

A figura ilustra o fluxo completo utilizado em estudos de radiômica e radiogenômica, desde a obtenção dos dados até a construção de modelos preditivos. O processo inicia no paciente, que fornece tanto imagens médicas (como CT, RM, PET/CT, entre outras) quanto dados clínicos e biológicos, como informações de biópsias, características genéticas, histórico clínico e parâmetros relacionados à resposta ao tratamento.

As imagens passam por etapas sucessivas de segmentação da lesão e pré processamento, que incluem normalização, filtragem e harmonização para padronizar os dados. Em seguida, ocorre o pipeline radiômico, no qual são aplicadas transformações matemáticas e extraídas características quantitativas associadas à intensidade, forma, textura e heterogeneidade tumoral.

Figura 3.1: Representação esquemática do fluxo de trabalho em estudos de radiômica e radio-genômica usados em modelos preditivos.



Fonte: Imagem gerada por inteligência artificial.

Paralelamente, dados clínicos e biológicos são integrados a esse conjunto, formando uma matriz estruturada com todas as variáveis do estudo.

Após a extração, as características passam por limpeza, filtragem e seleção, removendo redundâncias e mantendo apenas as variáveis mais estáveis e relevantes. Por fim, os dados refinados alimentam modelos estatísticos e de aprendizado de máquina, que podem ser utilizados para prever resposta terapêutica, toxicidade, prognóstico e auxiliar na tomada de decisão clínica.

Dessa forma, a figura resume o caminho que transforma informações brutas em conhecimento aplicável à medicina personalizada.

O interesse crescente na área decorre da capacidade de correlacionar dados radiômicos com prognóstico, resposta ao tratamento e padrões moleculares subjacentes. Evidências apontam que assinaturas radiômicas podem se relacionar a fenótipos genéticos específicos, contribuindo como biomarcadores não invasivos e repetíveis na avaliação oncológica [7, 9]. Ao quantificar propriedades intrínsecas do tumor, a radiômica torna-se um elo fundamental entre a imagem médica e modelos computacionais avançados, abrindo caminho para abordagens integradas como a radiogenômica.

3.3 APRENDIZADO DE MÁQUINA

O avanço dos métodos computacionais expandiu as possibilidades de análise de grandes volumes de dados produzidos pela radiômica e pela genômica. Nesse cenário, técnicas de aprendizado de máquina tornam-se essenciais para identificar padrões complexos, realizar classificações, prever resultados clínicos e selecionar variáveis relevantes [10]. Métodos supervisionados, como *Support Vector Machines* (SVM), *Gradient Boosting* (GB), *Random Forest* (RF), *Naive Bayes* (NB), *Logistic Regression* (LR), *k-Nearest Neighbors* (kNN) e *AdaBoost* são amplamente empregados em cenários de alta dimensionalidade, nos quais os conjuntos de dados incluem milhares de características por amostra, condição típica de estudos radiômicos e radiogenômicos [10]. Modelos não supervisionados, como técnicas de agrupamento (*clustering*), podem revelar subgrupos de pacientes com perfis semelhantes de resposta ao tratamento. A integração entre aprendizado de máquina e imagem médica tem mostrado grande potencial ao possibilitar a construção de sistemas que auxiliam na predição de toxicidade, resposta tumoral e recorrência, favorecendo o uso de abordagens cada vez mais individualizadas durante o planejamento radioterápico.

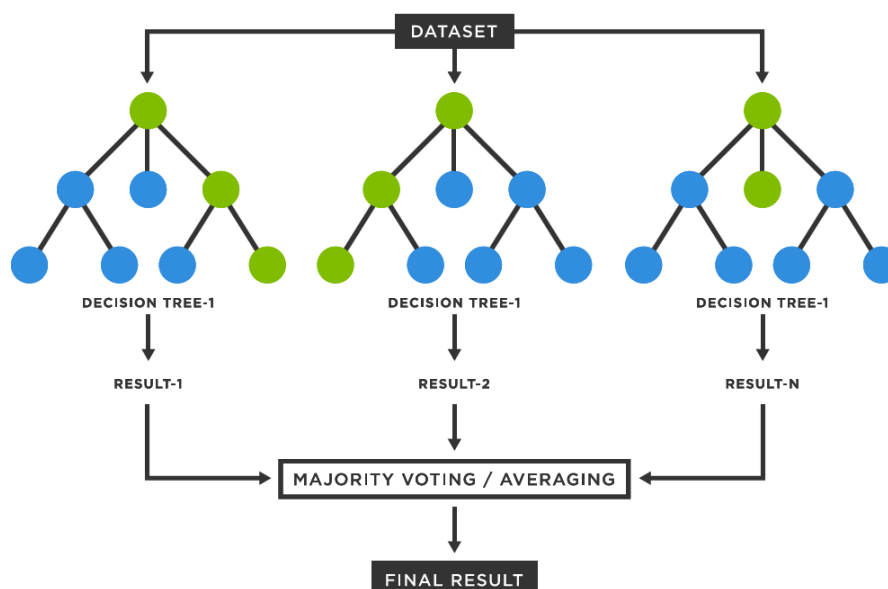
Como neste trabalho os melhores modelos desenvolvidos utilizaram algoritmos de RF, GB e LR, o funcionamento desses algoritmos é discutido em mais detalhes a seguir.

3.3.1 RANDOM FOREST

O algoritmo RF é um dos métodos supervisionados mais utilizados em aplicações radiômicas e radiogenômicas devido à sua robustez, capacidade de lidar com dados ruidosos e bom desempenho em cenários de alta dimensionalidade [11]. Trata-se de um modelo baseado em *ensemble learning* (aprendizado em conjunto), uma técnica computacional que combina as previsões de múltiplos modelos base para criar um resultado mais preciso e estável, no qual múltiplas árvores de decisão são construídas a partir de subconjuntos aleatórios de observações e variáveis. Durante a predição, cada árvore vota em uma saída e o modelo final adota a resposta majoritária ou média. Essa abordagem reduz significativamente o risco de *overfitting* (sobreajuste), fenômeno que ocorre quando o algoritmo memoriza excessivamente os dados de

treinamento, mas perde a capacidade de generalizar e prever corretamente os resultados para novos dados [11]. Em análises que combinam radiômica e dados genéticos, o RF apresenta desempenho elevado ao identificar quais características - entre centenas ou milhares - são mais informativas para prever radiosensibilidade, toxicidade ou resposta tumoral [11]. Além disso, o algoritmo fornece métricas de importância das variáveis, facilitando a interpretação do modelo e permitindo compreender quais padrões estruturais presentes nas imagens contribuem para os desfechos clínicos avaliados. Devido a essas propriedades, o RF se consolidou como um método central em *pipelines* de análise preditiva.

Figura 3.2: Uma representação com análise detalhada do algoritmo RF com três árvores de decisão que fornecem uma resposta individual e o algoritmo o RF computa um resultado como a média ou o resultado majoritário



Fonte: Adaptado de Prajapati, S. (2024); [16]

3.3.2 LOGISTIC REGRESSION

O algoritmo de LR é um método estatístico e de aprendizado de máquina supervisionado amplamente consolidado, sendo uma das abordagens mais tradicionais e confiáveis para resolver problemas de classificação binária [17]. Diferentemente dos algoritmos baseados em árvores de decisão, trata-se de um modelo probabilístico linear que estima a probabilidade de uma amostra pertencer a uma determinada classe, como, por exemplo, um subtipo molecular específico com base em uma combinação matemática das variáveis preditoras [17, 18]. Embora seja matematicamente mais simples em comparação aos métodos de *ensemble*, a LR destaca-se pela sua alta interpretabilidade e eficiência computacional, permitindo que os pesquisadores compreendam exatamente o peso e a direção (positiva ou negativa) que cada característica radiômica exerce sobre o resultado final [18].

Em cenários de alta dimensionalidade, típicos de estudos radiômicos e radiogenômicos, o modelo clássico de LR pode ser suscetível ao *overfitting*. Para contornar esse desafio, o algoritmo é frequentemente associado a técnicas de regularização, como a penalidade *Ridge* (L2) [19]. A regularização atua restringindo a magnitude dos coeficientes do modelo, o que penaliza variáveis excessivamente dominantes e distribui o peso da predição de forma mais equilibrada entre as características extraídas das imagens [19]. Essa abordagem controla a complexidade do modelo, garantindo uma melhor capacidade de generalização para novos dados clínicos [18, 19]. Em pesquisas oncológicas, a LR regularizada é frequentemente utilizada tanto como um modelo preditivo primário altamente eficaz quanto como um *baseline* (modelo de referência) rigoroso, sendo essencial em *pipelines* que buscam correlacionar padrões de imagem com desfechos biológicos de forma transparente e reproduzível [17, 18].

3.3.3 GRADIENT BOOSTING

O GB é um algoritmo de aprendizado supervisionado baseado em *ensemble learning*, amplamente utilizado em aplicações de radiômica devido à sua elevada capacidade preditiva [20]. Diferentemente do RF, que constrói árvores de decisão independentes, o GB gera árvores sequencialmente, de forma que cada nova árvore busca corrigir os erros cometidos pelas anteriores [20].

Esse processo iterativo permite que o modelo aprenda padrões complexos e relações não lineares entre as variáveis, tornando-o especialmente adequado para conjuntos de dados de alta dimensionalidade, como aqueles encontrados em estudos radiômicos [20]. Ademais, o algoritmo possibilita também estimar a importância das variáveis, contribuindo para a identificação das características mais relevantes para a classificação e predição de desfechos clínicos [20, 21].

Devido à sua robustez e precisão, o GB tem sido amplamente empregado em estudos oncológicos para a classificação tumoral, predição de resposta ao tratamento e análise prognóstica, constituindo uma ferramenta promissora para aplicações em medicina [20, 21].

3.4 CÂNCER DE MAMA E METÁSTASE CEREBRAL

O câncer de mama apresenta alta incidência global e destaca-se pela diversidade biológica refletida nos subtipos moleculares baseados no status dos receptores hormonais de estrogênio (ER, *Estrogen Receptor*) e progesterona (PR, *Progesterone Receptor*), além do marcador do receptor do fator de crescimento epidérmico humano 2 (HER2, *Human Epidermal Growth Factor Receptor 2*) [12, 13]. Esses subtipos determinam o comportamento tumoral, influenciando agressividade, padrão de disseminação e resposta ao tratamento [12]. A classificação molecular do câncer de mama é definida pela combinação da expressão desses três receptores.

- HER2: caracterizado pela superexpressão do receptor HER2, associado a um comportamento mais agressivo, porém com opções de terapias-alvo específicas.

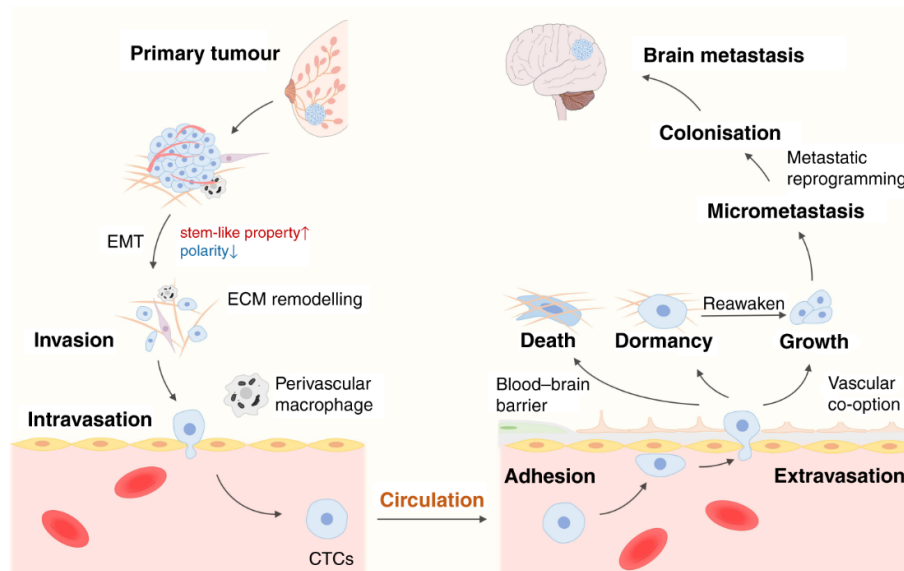
- *Triple Negative* (TN): não expressa ER, PR nem HER2. É o subtipo de pior prognóstico, com alta agressividade e opções terapêuticas limitadas.
- *Triple Positive* (TP): expressa simultaneamente ER, PR e HER2, apresentando um perfil biológico complexo e intermediário.

Em estágios avançados, o tumor pode originar metástases cerebrais, que representam um importante desafio clínico devido às limitações impostas pelo sistema nervoso central, pela barreira hematoencefálica e pela dificuldade de realizar biópsias seguras e representativas [15].

As metástases cerebrais podem ou não manter características biológicas do tumor primário, já que estudos mostram que o perfil de expressão hormonal pode sofrer alterações durante o processo metastático [12, 15]. Um tumor primário TP, por exemplo, pode originar uma metástase cerebral TN, e vice-versa. Essa dissociação molecular entre tumor primário e metástase é justamente o que torna a classificação do subtipo da lesão cerebral tão relevante clinicamente: o tratamento deve ser guiado pelo perfil biológico da metástase, não apenas pelo tumor original. Essas propriedades moldam a textura, a heterogeneidade e a organização estrutural da lesão, aspectos capturáveis por exames de ressonância magnética [12, 15].

A Figura 3.3 representa, de forma resumida, como se inicia a metástase cerebral a partir das células neoplásicas da mama.

Figura 3.3: Disseminação metastática de células de câncer de mama para o cérebro.



Fonte: Adaptado de Wang, Y., Ye, F., Liang, Y. *et al.* (2021). [22]

Conforme descrito por Wang, Y., Ye, F., Liang, Y. *et al.* [15], células do tumor primário podem adquirir propriedades invasivas, alcançar a corrente sanguínea e atravessar a barreira hematoencefálica, originando micrometástases cerebrais. Embora muitas células não sobrevivam nesse novo microambiente, algumas conseguem se adaptar, proliferar e formar metástases estabelecidas. Células tumorais dormentes também podem ser reativadas, favorecendo recorrência tumoral.

Ademais, ao quantificar as características extraídas das imagens das metástases, a radiômica permite identificar padrões relacionados ao subtipo molecular do tumor primário. A associação dessas características de imagem com dados biológicos conhecidos possibilita a aplicação da radiogenômica nesse contexto, impulsionando o desenvolvimento de modelos preditivos capazes de inferir o subtipo do tumor de mama a partir das metástases cerebrais [14, 15].

Essa abordagem ganha relevância clínica porque o perfil biológico do tumor pode mudar ao longo do tempo, e biópsias intracranianas nem sempre são viáveis. Assim, métodos não invasivos baseados em imagem tornam-se alternativas promissoras para complementar a avaliação biológica, auxiliando no planejamento terapêutico, incluindo condutas radioterápicas, já que diferentes subtipos do câncer de mama apresentam sensibilidades distintas à radiação [12, 14, 15]. A integração entre radiômica, radiogenômica e aprendizado de máquina, portanto, oferece potencial para melhorar a tomada de decisão clínica em casos de câncer de mama metastático para o cérebro.

4 METODOLOGIA

4.1 DESENHO DO ESTUDO E CARACTERIZAÇÃO DA CASUÍSTICA

O presente estudo utilizou como base o conjunto de dados público disponibilizado por Taha *et al.* (2025), composto por imagens de RM de pacientes com metástases cerebrais provenientes de câncer de mama, além de informações clínicas, moleculares e características radiômicas previamente extraídas [23]. Embora o banco original contenha dados em nível de lesão (*lesion-level*), incluindo múltiplas metástases para um mesmo paciente, neste trabalho a análise foi conduzida em nível de paciente (*patient-level*).

Para isso, as características radiômicas das lesões pertencentes a um mesmo indivíduo foram agregadas, gerando uma representação única para cada paciente. Após as etapas de seleção e processamento dos dados, a amostra final foi composta por 48 pacientes, cada um descrito por características radiômicas representativas de suas metástases cerebrais, pelo número total de lesões (*n_lesions*) e pelo respectivo subtipo molecular do câncer de mama.

Com base nessa amostra, foram construídos três conjuntos de dados independentes voltados para problemas de classificação binária. Cada conjunto foi estruturado para distinguir um subtipo molecular específico dos demais casos, agrupados sob a categoria *Other*. Dessa forma, foram desenvolvidos modelos para as classificações HER2 vs *Other*, TN vs *Other* e TP vs *Other*.

A Tabela 4.1 apresenta a caracterização dos conjuntos de dados utilizados. Observa-se que o conjunto referente ao subtipo TP apresentou o maior desbalanceamento entre as classes, contendo apenas cinco amostras positivas. Em contrapartida, o conjunto HER2 apresentou uma distribuição mais equilibrada entre as categorias avaliadas.

Tabela 4.1: Caracterização dos conjuntos de dados. Fonte: Elaborado pela autora.

<i>Dataset</i>	Total de amostras	Classe positiva	n (%)	<i>Other</i>	n (%)
HER2 vs <i>Other</i>	48	HER2	27 (56,3%)	TN e TP	21 (43,7%)
TN vs <i>Other</i>	48	TN	14 (29,2%)	HER2 e TP	34 (70,8%)
TP vs <i>Other</i>	48	TP	5 (10,4%)	HER2 e TN	43 (89,6%)

4.2 VARIÁVEIS UTILIZADAS E REDUÇÃO DE DIMENSIONALIDADE

As características radiômicas foram utilizadas como variáveis preditoras para o treinamento dos modelos. Os conjuntos de dados foram previamente processados e reduzidos, sendo aplicada a regressão LASSO (*Least Absolute Shrinkage and Selection Operator*) para seleção das características mais relevantes [24, 25]. A partir desse procedimento, foram selecionadas as cinco características radiômicas com maior poder preditivo para cada subtipo molecular. Esse processamento prévio foi fundamental para reduzir a alta dimensionalidade do problema, mitigando o risco de *overfitting* e permitindo uma análise mais objetiva dos padrões associados a cada classe [25].

Além das cinco características radiômicas, cada modelo utilizou uma variável clínica adicional correspondente ao número de lesões (*n_lesions*).

As características radiômicas usadas como variáveis finais utilizadas para cada classificação em cada modelo foram:

HER2 vs *Other*

- original_glcmm_Imc2_mean
- original_glcmm_Imc1_mean
- original_glcmm_Idm_mean
- original_glcmm_DifferenceAverage_mean
- original_glszm_LargeAreaLowGrayLevelEmphasis_mean
- *n_lesions*

Triple Negative vs *Other*

- original_gldm_LargeDependenceLowGrayLevelEmphasis_mean
- original_gldm_LongRunLowGrayLevelEmphasis_mean
- original_gldm_LowGrayLevelEmphasis_mean
- original_glcmm_MaximumProbability_mean
- original_glcmm_DifferenceAverage_mean

- *n_lesions*

Triple Positive vs Other

- *original_glszm_SizeZoneNonUniformityNormalized_mean*
- *original_glszm_HighGrayLevelZoneEmphasis_mean*
- *original_glszm_SmallAreaEmphasis_mean*
- *original_firstorder_Minimum_mean*
- *original_firstorder_10Percentile_mean*
- *n_lesions*

4.2.1 INTERPRETAÇÃO DAS CARACTERÍSTICAS SELECIONADAS

As variáveis radiômicas selecionadas pertencem a diferentes famílias de descritores de textura e intensidade, sendo capazes de caracterizar padrões de heterogeneidade, organização espacial e distribuição de sinal presentes nas metástases cerebrais.

A variável *n_lesions* corresponde ao número total de metástases identificadas no cérebro da paciente e foi utilizada como variável clínica complementar em todos os modelos.

As características derivadas da matriz de coocorrência de níveis de cinza (GLCM – *Gray Level Co-occurrence Matrix*) descrevem relações espaciais entre voxels vizinhos e permitem quantificar padrões de textura tumoral [23, 25]. Entre elas, *Imc1* e *Imc2* estão relacionadas ao grau de dependência entre intensidades vizinhas, refletindo a complexidade e organização da textura. A característica *Idm* avalia a homogeneidade local da imagem, enquanto *DifferenceAverage* mede a diferença média de intensidade entre voxels adjacentes, fornecendo informações sobre heterogeneidade tumoral [23, 25]. Já *MaximumProbability* representa o padrão de intensidade mais frequente observado na lesão [23, 25].

As variáveis da família GLSZM (*Gray Level Size Zone Matrix*) caracterizam regiões homogêneas formadas por voxels de intensidades semelhantes [23, 25]. A *feature LargeAreaLowGrayLevelEmphasis* quantifica grandes regiões de baixa intensidade, *SizeZoneNonUniformityNormalized* avalia a variabilidade do tamanho dessas regiões, *HighGrayLevelZoneEmphasis* mede a predominância de áreas de alta intensidade e *SmallAreaEmphasis* quantifica a presença de pequenas regiões homogêneas, associadas a texturas mais fragmentadas [23, 25].

As características provenientes da família GLDM (*Gray Level Dependence Matrix*) avaliam o grau de dependência entre voxels vizinhos [23, 25]. As variáveis *LargeDependenceLowGrayLevelEmphasis* e *LowGrayLevelEmphasis* estão relacionadas à presença de regiões extensas e homogêneas de baixa intensidade dentro da lesão [23, 25].

A família GLRLM (*Gray Level Run Length Matrix*) descreve sequências consecutivas de voxels com intensidades semelhantes [23, 25]. A característica *LongRunLowGrayLevelEmphasis* identifica longas sequências de baixa intensidade, sugerindo áreas extensas com padrão de textura uniforme [23, 25].

Por fim, as características de primeira ordem (*First Order*) descrevem a distribuição estatística dos valores de intensidade sem considerar relações espaciais [23, 25]. A variável *Minimum* corresponde ao menor valor de intensidade presente na lesão, enquanto *10Percentile* representa o valor abaixo do qual se encontram os 10% de voxels de menor intensidade, fornecendo informações sobre as regiões de menor sinal presentes no tumor [23, 25].

4.3 DESCRIÇÃO METODOLÓGICA E CONFIGURAÇÃO DOS MODELOS

Todos os modelos desenvolvidos neste estudo foram implementados no software Orange Data Mining (versão 3.36), uma plataforma de código aberto para análise de dados e aprendizado de máquina que oferece uma interface visual de programação, permitindo a construção de *pipelines* de forma intuitiva e reprodutível.

Inicialmente, foram testados quatro algoritmos de aprendizado de máquina: RF, GB, SVM e LR. Para a discussão posterior dos resultados, optou-se por destacar principalmente os modelos RF, GB e LR, uma vez que apresentaram os melhores desempenhos gerais.

Para garantir a padronização e otimização do aprendizado, os modelos foram configurados com hiperparâmetros específicos, detalhados na Tabela 4.2.

Tabela 4.2: Caracterização dos modelos analisados

Modelo	Configuração
RF	10 árvores; não dividir subconjuntos com menos de 5 amostras
LR	Regularização Ridge (L2); C = 1
SVM	Kernel RBF; C = 1
GB	100 árvores; Learning Rate = 0,1; profundidade máxima = 3

4.4 VALIDAÇÃO CRUZADA

Os modelos foram avaliados por meio de validação cruzada estratificada (*Stratified Cross Validation*). Esse método foi escolhido por garantir que a proporção das classes (Positiva e *Other*) fosse rigorosamente mantida em cada subconjunto de treinamento e teste.

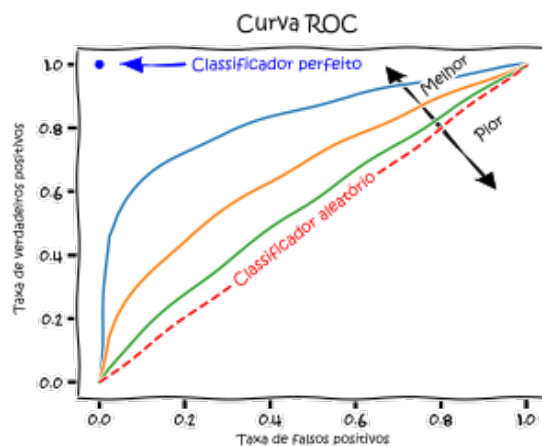
Para os conjuntos HER2 *vs Other* e TN *vs Other*, foram utilizadas 10 partições (10 *folds*). Para o conjunto TP *vs Other*, devido ao número reduzido de amostras da classe positiva, foram utilizadas 5 partições (5 *folds*).

4.5 MÉTRICAS DE AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO

Para avaliar a qualidade dos modelos, foram utilizadas diferentes métricas estatísticas. O desempenho dos classificadores foi avaliado utilizando as métricas AUC (*Area Under the Roc Curve*), *Accuracy* (CA), *Precision*, *Recall*, *F1-Score* e *Matthews Correlation Coefficient* (MCC) [8, 18].

O cálculo da AUC é feito a partir da curva ROC, que é um gráfico da taxa de verdadeiros positivos (sensibilidade) *versus* a taxa de falsos positivos [16]. A linha diagonal neste gráfico representa o desempenho aleatório (equivalente ao de jogar uma moeda, $AUC = 0,50$). Quanto mais a curva do modelo se afastar dessa linha diagonal em direção ao canto superior esquerdo do gráfico, maior a capacidade preditiva do modelo [17].

Figura 4.1: Ilustração de uma curva ROC.



Fonte: Adaptado de MartinThoma (2018). [26]

O cálculo da AUC é feito a partir da curva ROC, que é um gráfico da taxa de verdadeiros positivos (sensibilidade) *versus* a taxa de falsos positivos [16]. A linha diagonal neste gráfico representa o desempenho aleatório (equivalente ao de jogar uma moeda, $AUC = 0,50$). Quanto mais a curva do modelo se afastar dessa linha diagonal em direção ao canto superior esquerdo do gráfico, maior a capacidade preditiva do modelo [17].

Já o cálculo das demais métricas, é feito com base nos acertos e erros da classificação. Esses dados que são sumarizados na matriz de confusão, uma tabela que cruza os valores reais do problema com as previsões feitas pelo algoritmo, explicitando onde o modelo acertou e onde errou [8]. No cenário clássico de classificação binária, como o empregado neste estudo, a matriz é dividida em quatro quadrantes fundamentais, sendo que a diagonal principal (quadrantes: superior esquerdo e inferior direito) concentra os acertos (Verdadeiros Negativos e Verdadeiros Positivos), enquanto a diagonal secundária concentra os erros (Falsos Positivos e Falsos Negativos) [8].

Figura 4.2: Exemplo ilustrativo de uma Matriz de Confusão para classificação binária.[27]

		Valor Predito	
		Sim	Não
Real	Sim	Verdadeiro Positivo (TP)	Falso Negativo (FN)
	Não	Falso Positivo (FP)	Verdadeiro Negativo (TN)

Fonte: Adaptado de Nogare (2020).

4.5.1 AUC (AREA UNDER THE ROC CURVE)

A AUC foi utilizada como a principal métrica para comparar os modelos desenvolvidos, já que consegue medir a capacidade do modelo de conseguir separar as duas classes de classificação.

Quanto maior for o valor da curva AUC, significa que o modelo consegue distinguir melhor as classificações. Os valores variam entre 0 e 1, sendo interpretados seguindo os critérios apresentados na Tabela 4.3 [17].

Tabela 4.3: Critérios de interpretação dos valores da métrica AUC.

AUC	Interpretação
0,50	Aleatório
0,60–0,70	Razoável
0,70–0,80	Boa
0,80–0,90	Muito boa
> 0,90	Excelente

Fonte: Elaborado pela autora.

Por exemplo, se tivermos um valor AUC = 0,748, isso significa que existe aproximadamente 74,8% de chance de o modelo atribuir uma pontuação maior a um caso HER2 do que a um caso que não é HER2. Isso demonstra uma boa capacidade discriminatória para distinção entre os dois grupos.

4.5.2 CA (CLASSIFICATION ACCURACY)

A CA é a métrica que mostra a porcentagem total de acertos do modelo [8, 17, 18]. Ela pode ser calculada pela proporção de classificações corretas (acertos) realizadas pelo modelo em relação ao total de amostras avaliadas (total):

$$Accuracy = \frac{\text{Acertos}}{\text{Total}} \quad (4.1)$$

Por exemplo, um CA = 0,688 significa que 68,8% das amostras foram classificadas de forma correta. Embora seja simples de interpretar, a acurácia pode ser influenciada pelo desbalanceamento entre as classes, devendo ser analisada em conjunto com outras métricas.

4.5.3 F1-SCORE

F1-score é uma métrica que representa a combinação entre *Precision* (Precisão) e *Recall* (Sensibilidade) em um único valor, correspondendo a uma média harmônica entre essas duas medidas. Ela é muito útil quando há desbalanceamento entre as classes (mais dados de uma amostra do que de outra) [8, 17, 18].

Quanto mais próximo de 1 o valor de F1-score for, mais perfeita é a classificação. Seu cálculo é feito pela seguinte equação:

$$F1 = 2 \times \frac{Precision \times Recall}{Precision + Recall} \quad (4.2)$$

- *Precision* (Precisão Positiva)

Entende-se como uma maneira de verificar quantas das amostras classificadas como positivas pelo modelo realmente pertencem à classe positiva [8, 17, 18].

Responde à pergunta: "*Dos casos que o modelo classificou como pertencentes ao subtipo analisado, quantos realmente pertenciam a esse subtipo?*".

A fórmula é:

$$Precision = \frac{VerdadeirosPositivos}{VerdadeirosPositivos + FalsosPositivos} \quad (4.3)$$

Exemplo: *Precision* = 0,70 significa que 70% das previsões positivas estavam corretas.

- *Recall* (Sensibilidade)

Mede a capacidade do modelo de identificar corretamente os casos positivos [8, 17, 18].

Responde à pergunta: "*Quantos dos casos reais do subtipo analisado foram corretamente identificados pelo modelo?*".

Valores altos indicam que poucos casos positivos foram perdidos durante a classificação.

A fórmula é:

$$Recall = \frac{VerdadeirosPositivos}{VerdadeirosPositivos + FalsosNegativos} \quad (4.4)$$

Exemplo: *Recall* = 0,73 significa que o modelo encontrou 73% dos casos HER2 que existiam nos dados.

4.5.4 MCC (MATTHEWS CORRELATION COEFFICIENT)

O MCC é uma métrica amplamente utilizada e frequentemente considerada uma das mais robustas para avaliar modelos em bases biomédicas, pois é especialmente útil com dados desbalanceados [8, 17, 18]. Diferentemente da acurácia, o MCC considera todas as possibilidades da matriz de confusão: Verdadeiros Positivos (TP), Verdadeiros Negativos (TN), Falsos Positivos (FP) e Falsos Negativos (FN). Por considerar todas as classificações possíveis, o MCC

é frequentemente considerado uma das métricas mais robustas para avaliar modelos em bases biomédicas [8, 17, 18]. O seu cálculo é dado pela seguinte equação:

$$MCC = \frac{(TP \times TN) - (FP \times FN)}{\sqrt{(TP + FP)(TP + FN)(TN + FP)(TN + FN)}} \quad (4.5)$$

Os valores variam entre -1 e +1:

- +1 indica classificação perfeita;
- 0 indica desempenho equivalente ao acaso;
- -1 indica classificação totalmente incorreta.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1 FLUXOGRAMA DE ANÁLISE E DESEMPENHO GERAL DOS MODELOS

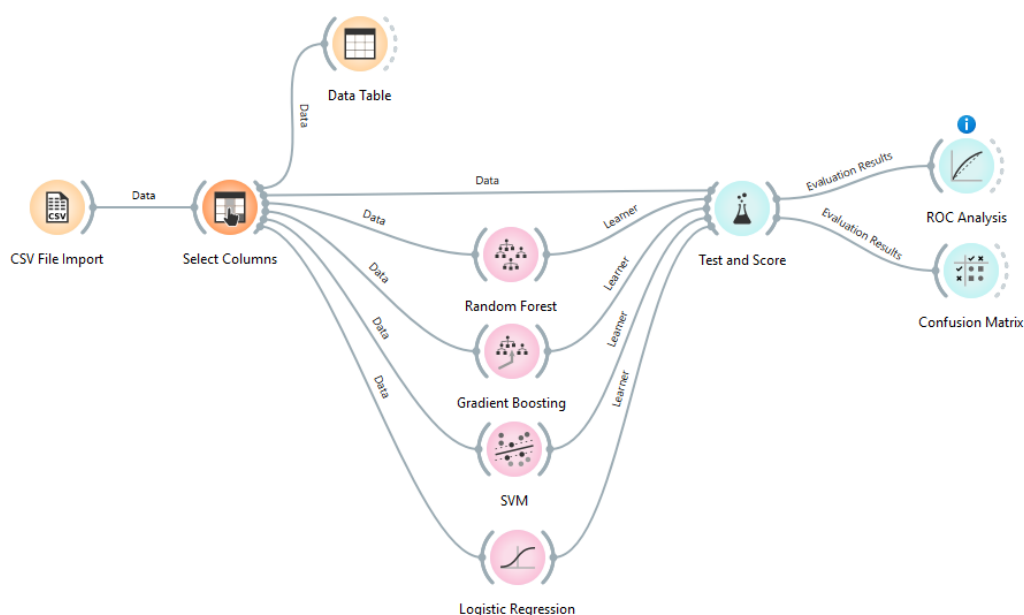
O processamento dos dados, desde a importação das características radiômicas até a avaliação final dos algoritmos de aprendizado de máquina, seguiu um fluxo estruturado e rigoroso desenvolvido na plataforma Orange Data Mining.

A Figura 5.1 ilustra o fluxograma completo utilizado na etapa de análise e coleta de dados, demonstrando as etapas de seleção de variáveis, treinamento e validação cruzada que embasaram os resultados deste estudo. Esse fluxograma descrito em ícones ilustra, com o primeiro (“*CSV File Import*”), que a tabela de dados elaborada, após a etapa de processamento inicial, foi importada no programa. Em seguida, o ícone “*Select Columns*” foi empregado para definir as variáveis preditoras e a variável alvo utilizada na classificação dos subtipos moleculares.

Posteriormente, o módulo “*Data Table*” permitiu a inspeção e verificação dos dados importados. Após essa etapa, os conjuntos de dados foram encaminhados para algoritmos de classificação. Para o treinamento, foram escolhidos quatro modelos preditivos, sendo os algoritmos RF, GB, SVM e LR, os quais apresentaram variações significativas no desempenho preditivo, dependendo do subtipo molecular apresentado.

Os modelos foram avaliados por meio do módulo “*Test and Score*”, utilizando validação cruzada (*cross-validation*) para estimar sua capacidade de generalização. Por fim, os módulos “*ROC Analysis*” e “*Confusion Matrix*” foram empregados para analisar o desempenho dos classificadores, permitindo a avaliação da capacidade discriminatória dos modelos e a identificação dos padrões de acertos e erros de classificação.

Figura 5.1: Fluxograma utilizado para análise e avaliação dos modelos de aprendizado de máquina no ambiente Orange Data Mining.



Fonte: Elaborada pela autora.

A partir desse fluxo de trabalho, foi possível comparar o desempenho dos quatro algoritmos avaliados. Os resultados demonstraram variações entre os modelos em função do subtipo molecular analisado. A Tabela 5.1 consolida os resultados obtidos para as métricas de AUC, Acurácia (CA), F1-Score, Precisão, Sensibilidade e MCC em cada um dos três conjuntos de dados.

Tabela 5.1: Desempenho dos algoritmos RF, GB, SVM e LR na classificação dos subtipos moleculares de câncer de mama utilizando características radiômicas. Os melhores resultados para cada métrica em cada conjunto de dados estão destacados em vermelho.

Classificação	Modelo	AUC	CA	F1-score	Precision	Recall	MCC
HER2 vs <i>Other</i>	RF	0.748	0.688	0.688	0.689	0.688	0.369
	SVM	0.457	0.646	0.645	0.672	0.646	0.319
	LR	0.325	0.542	0.453	0.489	0.542	-0.026
	GB	0.610	0.542	0.533	0.532	0.542	0.049
TN vs <i>Other</i>	RF	0.723	0.708	0.692	0.686	0.708	0.235
	GB	0.715	0.708	0.708	0.708	0.708	0.294
	SVM	0.607	0.688	0.577	0.497	0.688	-0.094
	LR	0.748	0.729	0.697	0.702	0.729	0.254
TP vs <i>Other</i>	RF	0.709	0.896	0.875	0.870	0.896	0.270
	GB	0.586	0.771	0.780	0.789	0.771	-0.129
	SVM	0.502	0.896	0.847	0.803	0.896	0.000
	LR	0.693	0.854	0.825	0.798	0.854	-0.071

Fonte: Elaborado pela autora.

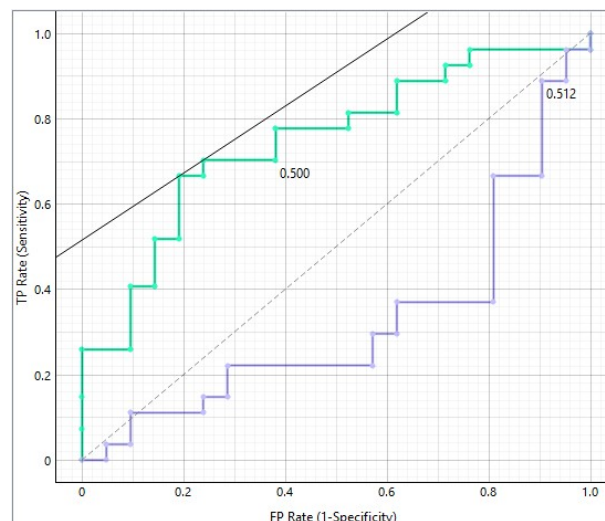
De maneira geral, os algoritmos RF, GB e LR destacaram-se como os mais consistentes e robustos do estudo. O RF apresentou o melhor desempenho global para a classificação dos subtipos HER2 e TP, enquanto a LR e o GB obtiveram a melhor performance na identificação do subtipo TN.

5.2 INTERPRETAÇÃO DAS AUCS E ANÁLISE POR SUBTIPO MOLECULAR

A métrica AUC foi estabelecida como o principal parâmetro para comparar os modelos, pois mede a capacidade real do algoritmo de separar as duas classes (o subtipo alvo vs. "Outros").

Para o conjunto HER2 vs. *Other*, o RF alcançou o melhor desempenho, com uma AUC de 0,748, classificada como "Boa" (intervalo de 0,70 a 0,80). Na prática, isso significa que existe aproximadamente 74,8% de chance de o modelo atribuir uma pontuação maior a um caso HER2 verdadeiro do que a um caso que não é HER2. O MCC de 0,369 reforça que a classificação foi superior ao acaso. A Figura 5.2 ilustra a Curva ROC e a matriz de confusão para este subtipo.

Figura 5.2: Curva ROC e matriz de confusão para o HER2, considerando o RF como o modelo que forneceu melhor desempenho.



Considere a curva verde para o modelo RF e a curva lilás para o modelo LR.

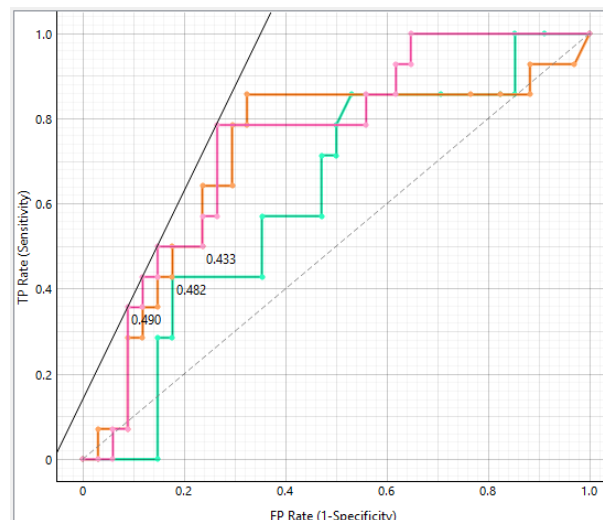
		Predicted		Σ
		HER2	Other	
Actual	HER2	19	8	27
	Other	7	14	21
Σ		26	22	48

Fonte: Elaborado pela autora.

Na análise da Curva ROC, observa-se claramente que a curva do RF (linha verde) se posiciona bem acima da linha cinza de aleatoriedade, demonstrando superioridade preditiva em relação à LR (linha lilás), que se manteve mais próxima à linha de base neste cenário. Ao mesmo tempo, a matriz de confusão reflete o equilíbrio das métricas: a concentração de amostras na diagonal principal evidência que o modelo foi capaz de classificar corretamente tanto os casos positivos (HER2) quanto os negativos ("Other") com proporções semelhantes de acerto, minimizando os erros na diagonal secundária.

No cenário TN vs. *Other*, os resultados obtidos não permitiram apontar de forma inequívoca um único modelo como superior. Embora a LR tenha apresentado a maior AUC (0,748) e a maior acurácia (0,729), os modelos RF e GB também demonstraram desempenho competitivo, evidenciando diferentes características de classificação. Diante disso, para uma análise mais detalhada, a Figura 5.3 apresenta os resultados da curva ROC e da matriz de confusão dos três modelos em questão.

Figura 5.3: Curva ROC e matriz de confusão para o TN, considerando (a) RF, (b) LR e (c) GB.



Considere a curva verde para o modelo RF, e a curva rosa para o modelo LR e a curva laranja para o modelo GB

(a) RF					(b) LR					(c) GB				
Actual	Predicted		Σ	Σ	Actual	Predicted		Σ	Σ	Actual	Predicted		Σ	Σ
	Other	Triple_Negative				Other	Triple_Negative				Other	Triple_Negative		
	Other	28	6	34		31	3	34	27		7	34		
	Triple_Negative	9	5	14		10	4	14	7		7	14		
	Σ	37	11	48	Σ	41	7	48	Σ	34	14	48		

Fonte: Elaborado pela autora.

A análise das curvas ROC, Figura 5.3, mostra que os modelos RF, LR e GB apresentaram desempenho superior ao acaso, com AUCs classificadas como "boas" para os três algoritmos. A LR apresentou a maior área sob a curva, indicando melhor capacidade global de discriminação entre pacientes TN e *Other* ao longo de diferentes limiares de decisão. O RF apresentou desempenho semelhante (AUC = 0,723), enquanto o GB obteve AUC de 0,715, evidenciando que

todos os modelos foram capazes de capturar informações relevantes presentes nas características radiômicas selecionadas

Entretanto, a análise isolada da AUC não permite compreender completamente o comportamento dos classificadores. Por esse motivo, as matrizes de confusão fornecem informações complementares importantes. Observa-se que a LR classificou corretamente 31 dos 34 pacientes pertencentes à classe *Other*, produzindo apenas três falsos positivos. Contudo, identificou corretamente apenas quatro dos 14 pacientes TN, resultando em dez falsos negativos. Esse comportamento sugere um modelo mais conservador, com elevada especificidade, mas menor capacidade de detectar pacientes pertencentes à classe minoritária.

O RF apresentou comportamento semelhante, classificando corretamente 28 pacientes *Other* e cinco pacientes TN. Embora tenha produzido um número maior de falsos positivos (6), apresentou uma distribuição mais equilibrada entre erros e acertos nas duas classes, refletindo-se em um MCC superior ao da LR (0,369 versus 0,254).

Por sua vez, o GB demonstrou o melhor equilíbrio entre as classes. O modelo identificou corretamente sete dos 14 pacientes TN e 27 dos 34 pacientes *Other*, resultando em valores idênticos de falsos positivos e falsos negativos (7 casos). Esse comportamento mais balanceado contribuiu para o maior valor de MCC (0,294) entre os três modelos avaliados para este subtipo, indicando melhor concordância global entre as classificações preditas e as observadas.

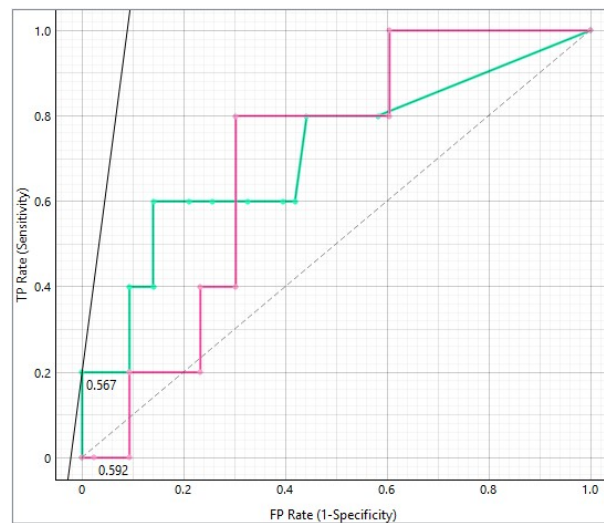
Sob uma perspectiva clínica, a escolha do modelo depende do objetivo da aplicação. Caso o interesse esteja voltado para maximizar a capacidade geral de discriminação, a LR apresenta vantagem devido à maior AUC observada. Por outro lado, se a prioridade for identificar um maior número de pacientes TN, reduzindo a ocorrência de falsos negativos, o GB demonstra desempenho mais equilibrado. O RF, por sua vez, apresentou resultados intermediários, combinando boa capacidade discriminatória com um comportamento relativamente estável entre as classes.

No cenário TP vs. *Other*, o RF apresentou o desempenho mais consistente entre os modelos avaliados, alcançando AUC de 0,709, acurácia de 0,896 e F1-Score de 0,875. Embora a LR tenha apresentado uma AUC próxima (0,693), seu desempenho global foi inferior em termos de F1-Score e MCC. A superioridade do RF sugere maior capacidade de capturar relações não lineares entre as características radiômicas selecionadas, aspecto frequentemente observado em estudos envolvendo dados de alta complexidade biológica. A Figura 5.4 detalha o desempenho deste classificador.

No gráfico da Curva ROC, Figura 5.4, o RF (linha verde) demonstra sua capacidade de discriminação ao manter-se acima da linha cinza tracejada, superando a LR (linha rosa) e garantindo uma área preditiva confiável ($AUC > 0,70$) mesmo diante da escassez de dados da classe positiva.

A interpretação da matriz de confusão deve ser realizada com cautela devido ao forte desbalanceamento do conjunto de dados, composto por apenas cinco amostras TP. Nesse contexto, a elevada acurácia observada pode ser influenciada pela predominância da classe "*Other*".

Figura 5.4: Curva ROC e matriz de confusão para o TP, considerando o RF como o modelo que forneceu melhor desempenho.



Considere a curva verde para o modelo RF e a curva rosa para o modelo LR.

		Predicted		
		Other	Triple_Positive	Σ
Actual	Other	42	1	43
	Triple_Positive	4	1	5
Σ		46	2	48

Fonte: Elaborado pela autora.

Ainda assim, o modelo foi capaz de identificar corretamente um dos cinco casos positivos, mantendo simultaneamente uma taxa muito baixa de falsos positivos, com apenas uma amostra da classe "Other" incorretamente classificada como TP.

Embora a sensibilidade para a classe positiva permaneça limitada, resultado esperado diante do reduzido número de exemplos disponíveis para treinamento, os resultados obtidos sugerem que as características radiômicas selecionadas apresentam potencial discriminatório para o subtipo TP. Dessa forma, o RF demonstrou ser o modelo mais promissor para esse cenário, embora estudos futuros com amostras mais amplas sejam necessários para confirmar a robustez e a capacidade de generalização dos achados.

5.3 DESBALANCEAMENTO DO TRIPLE POSITIVE

O conjunto TP apresentou o maior desafio analítico deste estudo devido ao seu desbalanceamento severo: a classe positiva conta com apenas cinco amostras (10,4%), enquanto a classe "Other" domina com 43 amostras (89,6%). Em cenários com essa discrepância, a avaliação do desempenho preditivo exige cautela, pois métricas tradicionais podem mascarar a ineficiência do modelo.

A Acurácia (CA), por exemplo, torna-se uma métrica ilusória. Se um algoritmo classificar todas as 48 amostras como pertencentes à classe majoritária ("*Other*"), ele atingirá automaticamente uma acurácia de 0,896 (89,6%), sem ter aprendido absolutamente nenhum padrão radiômico do subtipo TP. Esse fenômeno é perfeitamente ilustrado pelo desempenho do algoritmo SVM neste conjunto: o modelo alcançou a impressionante acurácia de 0,896, mas seu MCC foi de 0,000. Um MCC igual a zero indica que a capacidade preditiva do SVM foi equivalente ao acaso, ou seja, ele falhou completamente em identificar os casos positivos.

Em contrapartida, o algoritmo RF demonstrou notável robustez contra esse viés. Embora também tenha registrado uma acurácia de 0,896, o RF alcançou uma AUC de 0,709 e um MCC de 0,270. O valor positivo e clinicamente relevante do MCC comprova que o modelo não se limitou a classificar as amostras na classe majoritária. Pelo contrário, o RF efetivamente aprendeu os padrões radiômicos subjacentes e conseguiu discriminar a classe minoritária, validando o potencial das características de textura mesmo em condições estatísticas altamente desfavoráveis.

5.4 DIFERENÇAS ENTRE OS SUBTIPOS (HER2, TN E TP)

Os resultados obtidos refletem, em parte, a heterogeneidade biológica característica dos diferentes subtipos do câncer de mama. O conjunto HER2 vs. *Other*, que apresentou a distribuição mais equilibrada entre as classes (56,3% de casos positivos), permitiu um melhor aprendizado dos padrões radiômicos pelos algoritmos, resultando no maior valor de MCC do estudo (0,369) para o modelo RF.

No cenário TN vs. *Other*, os modelos LR, RF e GB apresentaram desempenhos semelhantes. A LR obteve a maior AUC (0,748) e acurácia (0,729), enquanto o GB alcançou o maior MCC (0,294) e *F1-score* (0,708). O RF também apresentou resultados competitivos, com AUC de 0,723. Esses achados sugerem que as características radiômicas associadas ao subtipo TN possuem bom potencial discriminatório, podendo ser identificadas tanto por modelos lineares quanto por abordagens baseadas em árvores de decisão.

Por outro lado, o conjunto TP vs. *Other* apresentou forte desbalanceamento entre as classes, com apenas cinco amostras positivas. Essa limitação impactou diretamente o desempenho dos modelos, tornando a identificação dos casos TP mais desafiadora. Ainda assim, o RF manteve desempenho satisfatório, obtendo AUC de 0,709 e MCC de 0,270, demonstrando capacidade de identificar padrões relevantes mesmo em condições desfavoráveis.

5.5 IMPORTÂNCIA DAS *FEATURES* RADIÔMICAS

Um dos achados mais relevantes deste estudo é a comprovação do poder preditivo das características radiômicas de textura. A capacidade dos modelos de alcançar AUCs classificadas como "Boas"(>0,70) utilizando apenas cinco *features* radiômicas (baseadas em matrizes

como GLCM, GLDM e GLSZM) combinadas à variável clínica de número de lesões ($n_{lesions}$) é notável.

Isso comprova a hipótese radiogenômica de que a arquitetura interna, a heterogeneidade e a distribuição de níveis de cinza das metástases cerebrais nas imagens de ressonância magnética carregam a "assinatura" do subtipo molecular do tumor primário de mama.

5.6 LIMITAÇÕES DO ESTUDO

Embora os resultados sejam promissores e comprovem a viabilidade da abordagem, o estudo apresenta limitações inerentes. A principal delas é o tamanho reduzido da amostra (48 pacientes por conjunto) e o severo desbalanceamento de classes, especialmente no subtipo TP. Conjuntos de dados pequenos podem limitar a capacidade de generalização dos algoritmos para populações externas. Além disso, a natureza retrospectiva do estudo implica que variações nos protocolos de aquisição das imagens (diferentes equipamentos ou parâmetros de ressonância) podem introduzir ruídos no cálculo das *features* radiômicas.

5.7 PERSPECTIVAS FUTURAS E APLICAÇÃO CLÍNICA

As perspectivas futuras para esta linha de pesquisa são amplas. A integração da radiômica com a inteligência artificial oferece uma ferramenta não invasiva, repetível e de baixo custo para a caracterização tumoral. Em casos de metástases cerebrais, onde a biópsia é um procedimento de alto risco e muitas vezes inviável, a capacidade de inferir o subtipo molecular apenas pela imagem médica representa um avanço imensurável.

Na prática da rádio-oncologia, prever o perfil biológico da metástase permite estimar a radiosensibilidade do tumor. Isso fornece suporte direto à tomada de decisão clínica, possibilitando a individualização das estratégias terapêuticas, como o ajuste de doses de radiação ou a indicação de terapias-alvo concomitantes, consolidando os preceitos da medicina personalizada e da radiogenômica.

Trabalhos futuros devem focar na ampliação da base de dados, em validações multicêntricas e no uso de técnicas de balanceamento sintético de dados (como o SMOTE) para aprimorar ainda mais a acurácia dos modelos preditivos.

6 CONCLUSÃO

O presente estudo demonstrou que a integração entre radiômica e aprendizado de máquina (*machine learning*) constitui uma ferramenta preditiva altamente eficaz para a classificação de subtipos moleculares do câncer de mama a partir de metástases cerebrais. A extração de características quantitativas de textura e heterogeneidade tumoral provou ser capaz de capturar

a "assinatura"biológica do tumor primário, confirmando de forma robusta a premissa central da radiogenômica.

A avaliação detalhada dos modelos preditivos revelou que a heterogeneidade biológica dos tumores exige abordagens matemáticas distintas. O algoritmo RF destacou-se como o modelo mais consistente para a classificação dos subtipos HER2 e TP. No caso específico do TP, o RF demonstrou notável capacidade de generalização ao superar o desbalanceamento severo de classes, identificando padrões radiômicos reais onde outros modelos falharam. Para o subtipo TN, a análise crítica das matrizes de confusão revelou que o GB apresentou o desempenho clinicamente mais seguro. Embora modelos lineares tenham atingido maior precisão global na classe majoritária, o GB minimizou os falsos negativos e identificou a classe minoritária (TN) com maior eficácia, um fator crucial dado a alta agressividade deste subtipo.

Do ponto de vista clínico, os achados deste trabalho possuem impacto direto na rádio-oncologia. A capacidade de inferir o subtipo molecular de uma metástase cerebral de forma não invasiva oferece uma alternativa segura em casos em que a biópsia intracraniana apresenta alto risco ou inviabilidade técnica. Essa predição permite estimar a radiosensibilidade da lesão com antecedência, fornecendo suporte à tomada de decisão para a individualização de doses de radiação e a prescrição de terapias-alvo concomitantes.

Apesar das limitações inerentes ao tamanho reduzido da amostra ($n=48$) e ao desbalanceamento natural dos bancos de dados oncológicos, o estudo estabelece uma base metodológica sólida, validando o uso da regressão LASSO para seleção de variáveis e do MCC para avaliação de dados assimétricos. Pesquisas futuras devem focar na validação destes modelos em coortes multicêntricas maiores e na aplicação de técnicas de balanceamento sintético, como o SMOTE.

Em suma, a união entre radioterapia, radiômica e inteligência artificial representa, de fato, uma nova fronteira na oncologia. Ao transformar imagens médicas em dados de alto valor biológico, esta abordagem aproxima a prática clínica dos ideais da medicina personalizada, promovendo tratamentos mais precisos, seguros e adaptados às características individuais de cada paciente.

Referências

- [1] KIM, J. H.; JENROW, K. A.; BROWN, S. L. Mechanisms of radiation-induced normal tissue toxicity and implications for future clinical trials. **Radiation Oncology Journal**, v. 32, n. 3, p. 103-115, 2014.
- [2] BROTHWELL, M. R. S. et al. Radiogenomics in the era of advanced radiotherapy. **Clinical Oncology**, v. 31, n. 5, p. 319-325, 2019.
- [3] MAVRAGANI, I. V. et al. Key mechanisms involved in ionizing radiation-induced systemic effects. A current review. **Toxicology Research**, v. 5, n. 1, p. 12-33, 2016.
- [4] STORY, M. D.; DURANTE, M. Radiogenomics and charged particle therapy. **Medical Physics**, v. 45, n. 11, p. e827-e830, 2018.
- [5] YIN, J. Narrative review of the use of Genomic-Adjusted Radiation Dose (GARD) in radiotherapy. **Cancers**, v. 16, n. 24, p. 4180, 2024.
- [6] RUBINI, D. et al. Genetic profiling in radiotherapy: a comprehensive review. **Frontiers in Oncology**, v. 14, p. 1445980, 2024.
- [7] STOYANOVA, R. et al. Radiomics for clinical decision support in radiation oncology. **Clinical Oncology**, v. 36, n. 10, p. 642-652, 2024.
- [8] AVANZO, M. et al. Machine and deep learning methods for radiomics. **Medical Physics**, v. 47, n. 5, p. e185-e202, 2020.
- [9] STOYANOVA, R. et al. Radiomics and radiogenomics in radiation oncology. **Radiology**, v. 281, n. 2, p. 340-353, 2016.
- [10] BI, W. L. et al. Artificial intelligence in cancer imaging: clinical challenges and applications. **CA: A Cancer Journal for Clinicians**, v. 69, n. 2, p. 127-157, 2019.
- [11] BREIMAN, L. Random forests. **Machine Learning**, v. 45, n. 1, p. 5-32, 2001.
- [12] RAGHAVENDRA, A. et al. Breast cancer brain metastasis: a comprehensive review. **npj Breast Cancer**, v. 10, n. 1, p. 1-12, 2024.
- [13] ZHANG, Y. et al. Breast cancer brain metastasis: immunological mechanisms and therapeutic potential. **Frontiers in Immunology**, v. 15, 2024.
- [14] YEH, R. et al. Breast cancer brain metastasis: MRI phenotype and heterogeneity associations. **Radiology**, v. 292, n. 3, p. 706-714, 2019.
- [15] WANG, Y. et al. Breast cancer brain metastasis: insight into molecular mechanisms and therapeutic strategies. **British Journal of Cancer**, v. 125, n. 8, p. 1056-1067, 2021.
- [16] PRAJAPATI, S. **Figura 2: A Deep Dive into the Random Fo-**

- rest Algorithm.** Disponível em: <https://blog.devops.dev/a-deep-dive-into-the-random-forest-algorithm-d4a8950507a3>. Acessado em: 04 de Junho de 2026.
- [17] HOSMER JR, D. W.; LEMESHOW, S.; STURDIVANT, R. X. **Applied Logistic Regression**. 3. ed. Hoboken: John Wiley & Sons, 2013.
- [18] PARMAR, C. et al. Machine learning methods in radiomics and radiogenomics. **Frontiers in Oncology**, v. 5, p. 272, 2015.
- [19] ZOU, H.; HASTIE, T. Regularization and variable selection via the elastic net. **Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)**, v. 67, n. 2, p. 301-320, 2005.
- [20] NATEKIN, A.; KNOLL, A. Gradient boosting machines, a tutorial. **Front Neuro-robot**. 2013 Dec 4;7:21. doi: 10.3389/fnbot.2013.00021. PMID: 24409142; PMCID: PMC3885826.
- [21] VAN DYK, K. et al. Associating persistent self-reported cognitive decline with neurocognitive decline in older breast cancer survivors using machine learning: The Thinking and Living with Cancer study. **J Geriatr Oncol**. 2022;13(8):1132-1140. doi:10.1016/j.jgo.2022.08.005.
- [22] WANG, Y. et al. **Figura 3: Metástase cerebral do câncer de mama: uma visão sobre os mecanismos moleculares e estratégias terapêuticas**. Br J Cancer 125, 1056–1067 (2021).
- [23] TAHA, B.R. et al. An Integrated Dataset of Metastatic Breast Cancer to the Brain with Imaging, Radiomics, and Tumor Genetics. **Sci Data** 12, 1851 (2025). <https://doi.org/10.1038/s41597-025-06066-6>
- [24] TIBSHIRANI, R. Regression shrinkage and selection via the lasso. **Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological)**, v. 58, n. 1, p. 267-288, 1996.
- [25] GILLIES, R. J.; KINAHAN, P. E.; HRICAK, H. Radiomics: images are more than pictures, they are data. **Radiology**, v. 278, n. 2, p. 563-577, 2016.
- [26] MARTINTHOMA. **Figura 4: ROC-Kurve**. Wikimedia Commons, 24 jun. 2018. Disponível em: <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Roc-draft-xkcd-style.svg>. Acesso em: 26 jun. 2026.
- [27] NOGARE, D. **Figura 5: Performance de Machine Learning – Matriz de Confusão**. Diego Nogare, 15 abr. 2020. Disponível em: <https://diegonogare.net/2020/04/performance-de-machine-learning-matriz-de-confusao/>. Acesso em: 26 jun. 2026.



GATOS INSTÁVEIS

Novas fronteiras da radioterapia: VMAT, Grid e Lattice
em sarcomas de tecidos moles

Liabilih Angela Ribas Schoemberger

Orientadora: Profa. Dra. Juliana Fernandes Pavoni
Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da
Universidade de São Paulo

2026



ESCOLA DE TALENTOS DO INSTITUTO PRINCIPIA
TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

LIABILIH ANGELA RIBAS SCHOEMBERGER

**Novas Fronteiras da Radioterapia:
VMAT, GRID e LATTICE em Sarcomas
de Tecidos Moles**

Orientadora:

Prof. Dra. Juliana Fernandes Pavoni

Coorientadores:

Bela. Laiane Simões Mioto

Bel. Victor Hugo Vasconcellos Nogueira Silva

SÃO PAULO – SP

Julho de 2026

Novas Fronteiras da Radioterapia: VMAT, GRID e LATTICE em Sarcomas de Tecidos Moles

Larissa Ribeiro do Amaral¹, Victor Hugo V. Nogueira Silva², Laiane Simões Miotto², Juliana Fernandes Pavoni²

¹ Escola de Talentos – Instituto Principia, Rua Pamplona, 145, São Paulo - SP

² Universidade de São Paulo, Av. Bandeirantes, 3900, Ribeirão Preto - SP

AGRADECIMENTOS

O encerramento deste ciclo tão especial desperta em mim um sentimento de gratidão e, ao mesmo tempo, de saudade. Foram aulas inesquecíveis, momentos marcantes e pessoas extraordinárias que fizeram desta etapa da minha vida uma experiência única, cujas memórias levarei comigo para sempre.

Agradeço ao Colégio Aliança, onde tive conhecimento das inscrições para a Escola de Talentos. Sem o incentivo e o apoio dos meus professores, jamais teria chegado até aqui. Agradeço também aos meus pais, que sempre me proporcionaram uma base sólida e estável, permitindo que eu pudesse aproveitar oportunidades tão especiais como participar deste projeto.

Expresso minha sincera gratidão aos professores da Escola de Talentos, Dr. Ricardo D'Elias Matheus, Dr. André Paschoal, Dr. Leonardo de Lima e Dr. Marcelo Moraes Guzzo, por todos os ensinamentos, orientações e apoio ao longo dessa jornada. Agradeço também ao nosso secretário, Wellington Barbosa, por toda a dedicação, ajuda e, principalmente, pela imensa paciência com todos nós.

Aos meus colegas, especialmente à minha turma, Gatos Instáveis, deixo meu muito obrigada por todos os momentos compartilhados, pelas risadas, aprendizados e amizades construídas durante essa caminhada. Agradeço, em especial, aos meus colegas de TCC, Larissa Ribeiro do Amaral, Filipe Campos Ribeiro e Rafael Alcantara Cabrera, por todo o companheirismo e pela oportunidade de trabalharmos juntos nesta segunda etapa da Escola de Talentos.

Agradeço à minha orientadora, Professora Dra. Juliana Fernandes Pavoni, por toda a orientação, dedicação e incentivo durante o desenvolvimento deste Trabalho de Conclusão de Curso. Estendo meus agradecimentos aos coorientadores Victor Hugo Vasconcellos e Laiane Simões Mioto, que contribuíram de forma significativa para o desenvolvimento das nossas pesquisas. Em especial, agradeço à Laiane, que auxiliou a mim e à Larissa nesta fase final do projeto e, além de uma excelente orientadora, tornou-se uma verdadeira amiga para nós. Agradeço à psicóloga Katiane Janke Krainski, que me ajudou a enfrentar meus medos e a ansiedade relacionados às apresentações, tornando esse desafio muito mais leve.

Às minhas melhores amigas, Nathalia Nowak de Mello e Lavinia Aparecida Drohmercki, agradeço por estarem sempre ao meu lado, oferecendo apoio, incentivo e carinho em todos os momentos.

Por fim, agradeço, acima de tudo, a Deus, por ter colocado este projeto em meu caminho e por me conceder força, coragem e perseverança para continuar, mesmo diante das dúvidas e incertezas.

Meu mais sincero agradecimento a todos que fizeram parte desta caminhada. Cada um de vocês contribuiu, de alguma forma, para que este momento se tornasse possível e inesquecível.

Resumo

A radioterapia é uma das principais modalidades utilizadas no tratamento do câncer, podendo ser realizada por diferentes técnicas de planejamento e entrega de dose. Entre as abordagens mais recentes, destacam-se as técnicas de radioterapia espacialmente fracionada, como GRID e LATTICE, que buscam concentrar altas e baixas doses de radiação em regiões específicas do tumor, e a radioterapia convencional, como a VMAT, que busca concentrar a dose de forma homogênea ao longo do volume tumoral. Neste trabalho, foi realizada uma comparação entre as técnicas VMAT, GRID e LATTICE por meio de simulações computacionais, em um caso de sarcoma de tecidos moles na panturrilha, obtido do banco de dados público The Cancer Imaging Archive (TCIA). Os planejamentos foram desenvolvidos no sistema Eclipse utilizando fótons de 6 MV e dose prescrita de 50 Gy em 25 frações. A análise foi realizada por meio da avaliação das distribuições de dose, dos histogramas dose-volume (DVHs) e dos perfis de dose. Os resultados demonstraram que a técnica VMAT apresentou distribuição de dose homogênea e cobertura uniforme do volume tumoral, enquanto as técnicas GRID e LATTICE apresentaram distribuições de dose heterogêneas, caracterizadas pela formação de regiões de alta e baixa dose. As porcentagens de dose obtidas nas regiões de pico e vale correspondentes, respectivamente, a aproximadamente 85% e 20% da dose prescrita, para a técnica GRID, enquanto que para a técnica LATTICE os valores foram de 107% para os picos e 17% para os vales. Além disso, observou-se que a técnica LATTICE possibilitou maior controle da localização dos picos de dose no interior do tumor, devido à sua característica de projeção tridimensional e personalizada, quando comparada à GRID, que apresenta menor controle, pois deposita a dose de forma mais regular e padronizada. Conclui-se que as técnicas avaliadas apresentam características dosimétricas distintas e que a radioterapia espacialmente fracionada representa uma alternativa promissora para a entrega seletiva de dose em tumores volumosos. O estudo contribuiu para a compreensão dos princípios envolvidos no planejamento radioterápico e das diferenças entre as técnicas convencionais e as espacialmente fracionadas.

Palavras-Chaves: Radioterapia; VMAT; GRID; LATTICE; Sarcoma de tecidos moles.

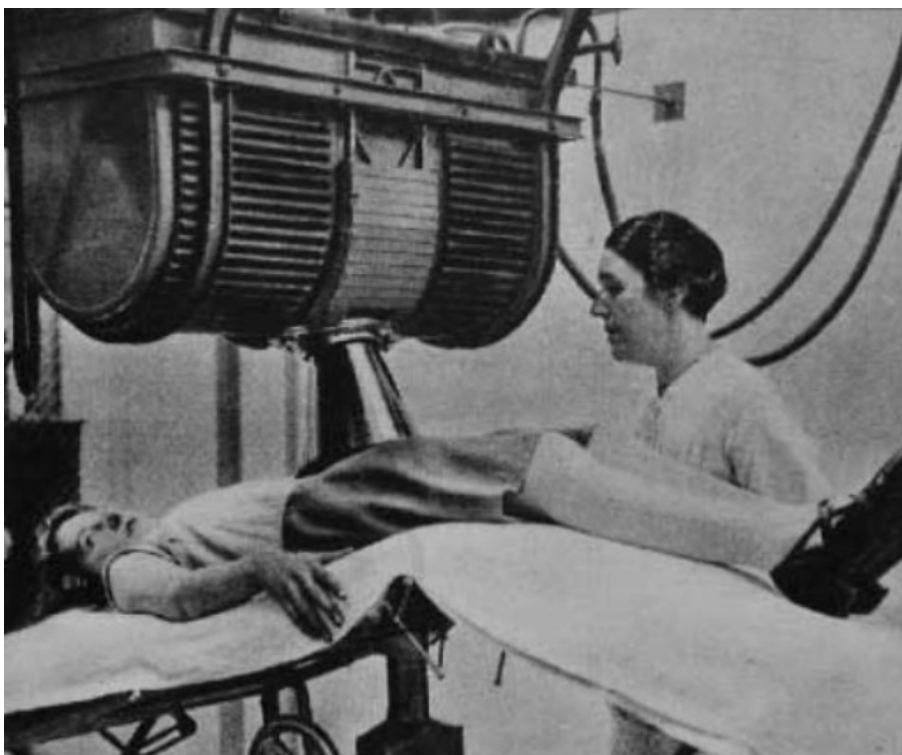
Sumário

1	INTRODUÇÃO	2
2	OBJETIVOS	4
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	4
3.1	RADIOTERAPIA	4
3.2	SARCOMAS DE TECIDO MOLE E A RADIOTERAPIA COMO TRATA- MENTO	7
3.3	RADIOTERAPIA ESPACIALMENTE FRACIONADA	8
3.4	A TÉCNICA GRID	9
3.5	A TÉCNICA LATTICE	9
3.6	EFEITOS BIOLÓGICOS RELACIONADOS À RADIOTERAPIA ESPACI- ALMENTE FRACIONADA	11
3.7	EFEITO ESPECTADOR	11
3.8	EFEITO ABSCOPAL	12
4	METODOLOGIA	12
4.1	BASE DE DADOS	13
4.2	PLANEJAMENTO RADIOTERÁPICOS	13
4.2.1	<i>PLANEJAMENTO VMAT</i>	13
4.2.2	<i>PLANEJAMENTO DE RADIOTERAPIA ESPACIALMENTE FRACIO- NADA</i>	14
4.3	AVALIAÇÃO DOSIMÉTRICA	16
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	16
5.1	DISTRIBUIÇÃO DE DOSE	16
5.2	HISTOGRAMA DE DOSE-VOLUME (DVH)	18
5.3	PERFIL DE DOSE	21
6	CONCLUSÃO	23

1 INTRODUÇÃO

A descoberta dos raios X por Wilhelm Conrad Röntgen, em 1895, marcou o início de uma nova era na medicina, possibilitando não apenas avanços no diagnóstico por imagem, mas também o desenvolvimento de aplicações terapêuticas da radiação ionizante [1]. Pouco tempo após sua descoberta, observou-se que a exposição à radiação era capaz de produzir diversos efeitos biológicos nos tecidos, incluindo vermelhidão, descamação e ulcerações [1]. O reconhecimento desses efeitos motivou as primeiras investigações sobre o potencial da radiação no tratamento de doenças neoplásicas. Nesse contexto, Emil Grubbe destacou-se como um dos pioneiros na utilização da radiação para o tratamento do câncer de mama [1, 2, 3]. Os primeiros procedimentos eram realizados com aparelhos de raios X adaptados para fins terapêuticos, como exemplificado na Figura 1.1.

Figura 1.1: Representação de um dos primeiros aparelhos utilizados em radioterapia



Adaptado de Sociedade Brasileira de Radioterapia [4].

Ao longo das últimas décadas, a radioterapia consolidou-se como uma das principais modalidades terapêuticas para o tratamento do câncer, utilizando radiação ionizante para destruir células tumorais ou impedir sua proliferação [3]. Seu mecanismo de ação baseia-se na capacidade da radiação de induzir alterações no DNA celular, resultando em morte celular ou perda da capacidade reprodutiva [1, 3]. Essas alterações podem ocorrer por ação direta da radiação sobre a molécula de DNA ou, mais frequentemente, por ação indireta, quando a radiação interage com moléculas de água presentes no meio intracelular, gerando radicais livres capazes de provocar lesões no material genético [1, 3].

Entre as principais lesões induzidas pela radiação destacam-se as quebras de fita simples e dupla do DNA. Enquanto as quebras simples geralmente são reparadas com eficiência pelos mecanismos celulares, as quebras duplas apresentam maior complexidade e podem resultar em morte celular ou em alterações permanentes no genoma. Além disso, a presença de oxigênio potencializa os efeitos da radiação ao estabilizar os danos induzidos ao DNA, dificultando seu reparo [1, 3]. Embora a radiação afete tanto células tumorais quanto tecidos saudáveis, as células cancerígenas tendem a apresentar maior radiosensibilidade, tornando possível sua eliminação seletiva. Nesse contexto, o planejamento radioterápico desempenha papel fundamental ao buscar maximizar o controle tumoral e minimizar a ocorrência de efeitos adversos nos tecidos normais, mantendo a dose dentro de uma janela terapêutica adequada [3].

Com o avanço das pesquisas, tornou-se evidente que a forma de administrar a dose de radiação era tão importante quanto a dose total aplicada. Nesse contexto, observou-se que a divisão da dose total em múltiplas aplicações ao longo do tratamento permitia aumentar a eficácia terapêutica sem causar danos excessivos aos tecidos saudáveis, contribuindo para o desenvolvimento do conceito de fracionamento de dose [3, 4, 5]. Esse princípio consiste na administração da dose total em várias frações ao longo do tempo, permitindo maior recuperação dos tecidos normais entre as sessões. Além disso, o fracionamento explora diferenças radiobiológicas entre tecidos saudáveis e tumorais, relacionadas a processos como reparo celular, redistribuição no ciclo celular, repopulação e reoxigenação, contribuindo para o aumento da eficácia do tratamento e para a redução dos efeitos adversos [1, 3].

Os avanços tecnológicos observados nas últimas décadas possibilitaram o desenvolvimento de aceleradores lineares (LINAC) e sistemas de planejamento cada vez mais sofisticados, permitindo maior precisão na entrega da dose de radiação. Na radioterapia convencional, a dose é distribuída de forma relativamente homogênea no volume tumoral [3]. Entretanto, essa abordagem apresenta limitações, especialmente no tratamento de tumores volumosos, que frequentemente apresentam regiões hipóxicas e, conseqüentemente, maior resistência à radiação [5]. Nesses casos, o aumento da dose poderia favorecer o controle tumoral, porém também elevaria o risco de toxicidade nos tecidos saudáveis adjacentes [5].

Diante dessas limitações, surgiram novas estratégias de tratamento, entre elas a radioterapia espacialmente fracionada (*Spatially Fractionated Radiation Therapy* – SFRT) [5, 6]. Diferentemente da radioterapia convencional, essa abordagem utiliza uma distribuição heterogênea da dose, caracterizada pela alternância entre regiões de alta dose (picos) e regiões de baixa dose (vales) [5, 6, 7, 8, 9]. Entre as principais modalidades de SFRT destacam-se a radioterapia GRID, que utiliza um padrão bidimensional de irradiação em grade, e a radioterapia LATTICE, considerada uma evolução tridimensional da técnica GRID, empregando modulação dos feixes para criar regiões estrategicamente distribuídas de alta dose no interior do tumor [5, 6, 7, 8, 9].

Além das diferenças físicas e dosimétricas na distribuição da dose, evidências experimentais sugerem que a radioterapia espacialmente fracionada pode desencadear respostas biológicas distintas daquelas observadas na radioterapia convencional. Entre os mecanismos propo-

tos destacam-se o efeito espectador (*bystander effect*) e o efeito abscopal, que podem contribuir para a resposta tumoral inclusive em regiões não diretamente irradiadas [9, 10, 11, 12].

O interesse por essas técnicas é particularmente relevante em tumores volumosos e de difícil tratamento, como os sarcomas de tecido mole, que frequentemente apresentam grandes dimensões e proximidade com estruturas anatômicas críticas. Nesses casos, estratégias capazes de intensificar a dose em regiões específicas do tumor, mantendo níveis aceitáveis de exposição aos tecidos saudáveis, podem representar uma alternativa promissora para otimizar o tratamento radioterápico.

Dessa forma, torna-se relevante investigar como diferentes estratégias de distribuição de dose influenciam as características dosimétricas do tratamento, bem como avaliar as potenciais vantagens e limitações associadas às técnicas convencional, GRID e LATTICE em casos de tumores volumosos, como os sarcomas de tecido mole.

2 OBJETIVOS

O presente trabalho tem como objetivo comparar a radioterapia convencional e as técnicas de radioterapia espacialmente fracionada GRID e LATTICE por meio da análise da distribuição de dose e de parâmetros dosimétricos obtidos em simulações realizadas em um sistema de planejamento radioterápico aplicadas a um caso de sarcoma de tecido mole.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

3.1 RADIOTERAPIA

A radioterapia é uma das principais modalidades utilizadas no tratamento do câncer, baseada no uso de radiação ionizante, com o objetivo de destruir células tumorais ou impedir sua proliferação [3]. Seu efeito biológico ocorre principalmente por meio de danos ao DNA celular, levando à morte celular ou à perda da capacidade de divisão [3].

Nessa abordagem tradicional, busca-se entregar uma distribuição da dose de radiação homogênea no volume alvo tumoral, garantindo que toda a região do tumor receba a dose necessária para o controle da doença [3]. Paralelamente, controla-se a dose entregue aos tecidos saudáveis ao seu redor, de modo a limitar, a níveis aceitáveis, os danos a esses tecidos [3].

Para isso, o tratamento radioterápico não é realizado com um único feixe incidindo diretamente sobre a região tumoral, pois essa abordagem resulta em uma distribuição inadequada da dose. Como a radiação perde intensidade à medida que penetra no corpo, um campo único resultaria em dose excessiva nos tecidos saudáveis superficiais e em dose insuficiente na região mais profunda onde o tumor se localiza. Em vez disso, diferentes feixes são direcionados ao tumor a partir de múltiplos ângulos, permitindo que a dose se concentre no volume tumoral, enquanto os tecidos normais recebem quantidades menores de radiação [3].

O planejamento do tratamento é individualizado de acordo com características como tamanho, forma e localização do tumor. Além disso, podem ser empregadas técnicas como a radioterapia conformacional tridimensional (3D-CRT), a radioterapia de intensidade modulada (IMRT) e a terapia por arco volumétrico modulado (VMAT) [3].

O planejamento do tratamento é individualizado de acordo com características como tamanho, forma e localização do tumor. Além disso, podem ser empregadas técnicas como a radioterapia conformacional tridimensional (3D-CRT), a radioterapia de intensidade modulada (IMRT) e a terapia por arco volumétrico modulado (VMAT) [3].

Dentre as técnicas modernas de radioterapia convencional, a 3D-CRT utiliza imagens tridimensionais de tomografia computadorizada (TC) para conformar os campos de radiação ao volume tumoral, proporcionando melhor cobertura do alvo em comparação às técnicas mais antigas. Os dados tomográficos gerados são transferidos para um Sistema de Planejamento de Tratamento (TPS), no qual é realizado o delineamento volumétrico detalhado das estruturas de interesse, como o Volume Alvo de Planejamento (PTV) e os Órgãos em Risco (OARs), correspondentes às estruturas sadias cujos limites de tolerância biológica à radiação não devem ser excedidos [3].

Na etapa seguinte, definem-se o número de campos a utilizar e as angulações de entrada no paciente. A conformação geométrica desses feixes é realizada mecanicamente por colimadores de múltiplas folhas (MLC, do inglês, *multileaf collimators*), dispositivos acoplados ao acelerador linear, compostos por dezenas de lâminas metálicas estreitas que podem se mover de forma independente, moldando o feixe de radiação dinamicamente à projeção tridimensional do PTV em cada ângulo escolhido [3].

Após a definição dos parâmetros de tratamento, o planejamento atinge sua etapa analítica por meio do cálculo computadorizado da soma das doses entregues por esses múltiplos feixes angulares de megavoltagem que convergem radialmente em direção ao tumor. Na técnica 3D-CRT, é realizado o planejamento direto, que corresponde a um método de tentativa e erro conduzido pelo operador (físico médico ou dosimetrista), no qual são definidos manualmente todos os parâmetros técnicos da máquina, e o computador apenas calcula a dose resultante. Se o resultado não for satisfatório, o operador ajusta os parâmetros e repete o processo até atender aos critérios clínicos [3].

A distribuição de dose final pode ser avaliada corte a corte na anatomia do paciente ou em uma ferramenta quantitativa chamada histograma de dose-volume (DVH, do inglês *Dose-Volume Histogram*), que resume dados anatômicos complexos em um gráfico bidimensional que correlaciona a dose recebida (em Gy ou %) com a fração de volume do órgão (em % ou cm³), permitindo a avaliação da cobertura do volume-alvo e da dose recebida pelos órgãos de risco [3].

A evolução dos sistemas de planejamento e dos aceleradores lineares possibilitou o desenvolvimento de técnicas cada vez mais sofisticadas para a entrega da dose de radiação. Entre elas destaca-se a IMRT, considerada uma evolução da radioterapia conformacional tridimensi-

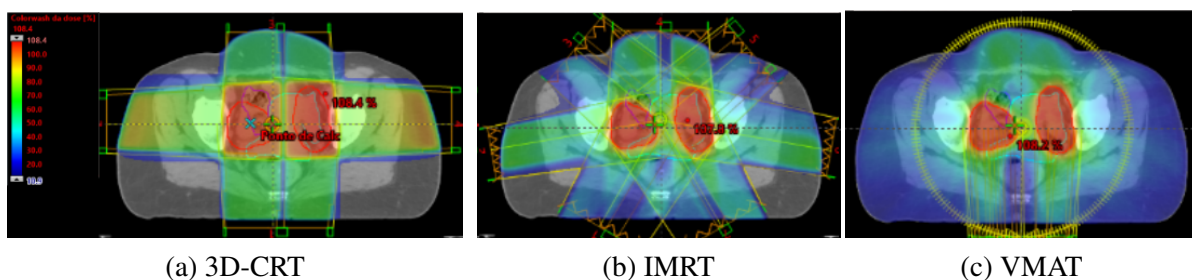
onal. Diferentemente da 3D-CRT, que utiliza planejamento direto (*forward planning*), a IMRT emprega planejamento inverso (*inverse planning*), no qual o operador estabelece objetivos dosimétricos para o volume-alvo e restrições de dose para os órgãos de risco. A partir desses critérios, algoritmos de otimização calculam automaticamente a fluência ideal dos feixes de radiação para alcançar a distribuição de dose desejada.

Na técnica IMRT, a radiação é administrada por meio de múltiplos campos fixos posicionados em diferentes ângulos ao redor do paciente. A intensidade do feixe é modulada pelos colimadores multilâminas (MLC), permitindo que diferentes regiões de um mesmo campo recebam intensidades distintas de radiação. Essa modulação proporciona distribuições de dose altamente conformadas, favorecendo a cobertura do volume tumoral e a preservação dos tecidos saudáveis adjacentes quando comparada à 3D-CRT [3].

Uma evolução da IMRT é a VMAT. Nessa técnica, o acelerador linear realiza movimentos rotacionais contínuos ao redor do paciente durante a irradiação, permitindo a entrega da dose a partir de múltiplos ângulos ao longo de um ou mais arcos de tratamento. Assim como na IMRT, o planejamento é realizado por meio de otimização inversa. Entretanto, durante a execução do tratamento ocorre a modulação simultânea da intensidade do feixe, da velocidade de rotação do *gantry* e da posição das lâminas do MLC, possibilitando elevada conformação da dose ao volume tumoral. Além de manter a precisão dosimétrica característica da IMRT, a VMAT apresenta como vantagem a redução do tempo de tratamento e do número de unidades monitoras necessárias para a entrega da dose, contribuindo para maior conforto do paciente e menor probabilidade de movimentação durante a irradiação [3].

A Figura 3.1 ilustra as diferenças entre as técnicas 3D-CRT, IMRT e VMAT, evidenciando a evolução na conformação e na modulação da dose de radiação.

Figura 3.1: Representação das diferenças na distribuição e entrega da dose entre as técnicas.



Fonte: Elaborada pela autora.

Observa-se que a IMRT e a VMAT apresentam maior capacidade de conformação da dose ao volume-alvo quando comparadas à 3D-CRT, contribuindo para uma melhor preservação dos tecidos sadios adjacentes.

Ademais, a avaliação dos planejamentos radioterápicos não se limita à análise visual das distribuições de dose ou dos histogramas dose-volume. Para garantir a padronização da prescrição e da avaliação dos tratamentos, recomendações internacionais foram estabelecidas por organismos especializados [8].

A Comissão Internacional de Unidades e Medidas de Radiação (ICRU) estabelece recomendações para a prescrição e o registro da dose em radioterapia, padronizando a nomenclatura dos volumes de tratamento. Dentre essas recomendações, destaca-se que a dose deve ser prescrita no Volume Alvo do Planejamento (PTV, do inglês, *Planning Target Volume*), com limiar de tolerância à heterogeneidade estipulado e rigorosa validação da dose nos Órgãos de Risco (OAR, do inglês, *Organ at Risk*) [8].

Os documentos iniciais do ICRU, números 50 e 62, recomendam que a dose no PTV varie entre 95% e 107% da dose de referência prescrita. Já o documento ICRU 83, que surgiu como uma evolução das recomendações para adequação às técnicas de intensidade modulada, passou a recomendar a avaliação da dose quase-máxima avaliada como a dose em 2% do volume (D2%) e dose quase-mínima, avaliada como a dose em 98% do volume (D98%), descartando assim os picos extremos isolados, mas deixou de preconizar um valor de corte ou limite numérico rígido e obrigatório [8].

Por fim, embora as técnicas modernas de radioterapia permitam elevada precisão na entrega da dose, alguns desafios ainda permanecem, especialmente no tratamento de tumores de grande volume [1, 3]. Nessas situações, a necessidade de administrar doses capazes de promover o controle tumoral pode resultar em maior exposição dos tecidos sadios circundantes à radiação [1, 3, 5]. Além disso, a presença de áreas hipóxicas no interior do tumor pode reduzir a radiosensibilidade celular e comprometer a resposta ao tratamento.

Diante dessas limitações, novas abordagens têm sido investigadas com o objetivo de aumentar a eficácia terapêutica sem elevar significativamente a toxicidade aos tecidos normais. Nesse contexto, a radioterapia espacialmente fracionada surge como uma alternativa promissora, utilizando distribuições heterogêneas de dose para favorecer o controle tumoral e estimular respostas biológicas diferenciadas [5, 6, 7].

3.2 SARCOMAS DE TECIDO MOLE E A RADIOTERAPIA COMO TRATAMENTO

Os sarcomas de tecidos moles constituem um grupo heterogêneo de neoplasias malignas originadas em tecidos mesenquimais, como músculos, gordura, vasos sanguíneos, tecido fibroso e tecido conjuntivo [8]. Embora sejam considerados tumores raros, correspondendo a uma pequena parcela dos cânceres diagnosticados em adultos, apresentam elevada diversidade histológica e comportamento clínico variável. Frequentemente, esses tumores podem atingir grandes dimensões antes do diagnóstico, especialmente quando localizados em regiões profundas do corpo [8].

Devido às suas características clínicas e anatômicas, o tratamento dos sarcomas de tecidos moles geralmente envolve uma abordagem multidisciplinar, combinando cirurgia e radioterapia. Segundo as diretrizes da *European Society for Radiotherapy and Oncology* (ESTRO), endossado pela *American Society for Radiation Oncology* (ASTRO), a radioterapia desempe-

nha papel fundamental no tratamento dos sarcomas de tecidos moles das extremidades e da parede torácica/tronco. Em muitos casos, a radioterapia é empregada de forma associada à cirurgia, especialmente em tumores volumosos, profundos ou com maior risco de recorrência local, contribuindo para o aumento do controle local da doença e para a preservação funcional das estruturas acometidas [8].

As diretrizes atuais recomendam a utilização de técnicas modernas de tratamento, como a IMRT e a VMAT, além da administração de doses pré-operatórias em torno de 50 Gy, geralmente fracionadas em 25 sessões de 2 Gy [8]. Apesar dos avanços tecnológicos observados nas últimas décadas, o tratamento de tumores muito volumosos ainda representa um desafio clínico, uma vez que a necessidade de intensificação da dose pode aumentar a exposição dos tecidos saudáveis adjacentes e elevar o risco de toxicidade.

Nesse contexto, os sarcomas de grandes dimensões têm se tornado um dos principais cenários de investigação para técnicas de radioterapia espacialmente fracionada, como GRID e LATTICE, que buscam aumentar a eficácia terapêutica por meio de distribuições heterogêneas de dose sem elevar proporcionalmente a toxicidade aos tecidos normais [1, 3, 5].

3.3 RADIOTERAPIA ESPACIALMENTE FRACIONADA

Nos anos 1950, a medicina enfrentava um grande desafio no tratamento de tumores volumosos: doses suficientemente altas para promover o controle tumoral frequentemente causavam danos severos aos tecidos saudáveis adjacentes, enquanto doses mais baixas se mostravam insuficientes para eliminar a neoplasia [1, 3]. Além disso, esses tumores frequentemente apresentam regiões necróticas e hipóxicas (com baixa oxigenação), o que reduz a eficácia da radiação e dificulta ainda mais o tratamento [1, 3].

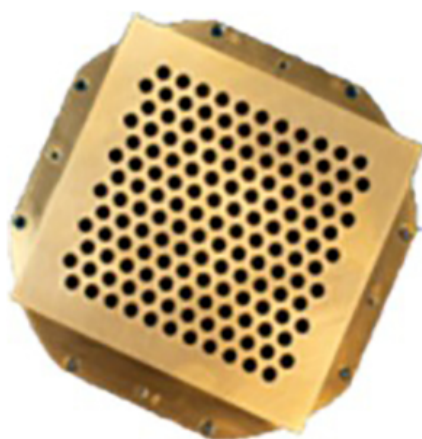
Diante desse cenário, surgiu o conceito de radioterapia espacialmente fracionada (SFRT, do inglês *Spatially Fractionated Radiation Therapy*), que propõe uma abordagem diferenciada para a distribuição da dose de radiação [2, 10]. Diferentemente da radioterapia convencional, que busca uma deposição relativamente homogênea da dose no volume tumoral, a SFRT utiliza uma distribuição heterogênea, caracterizada pela presença de regiões de alta dose (picos) intercaladas com regiões de baixa dose (vales) [2, 10]. Esse padrão permite administrar doses elevadas em partes específicas do tumor, ao mesmo tempo em que preserva parcialmente os tecidos saudáveis e pode favorecer respostas biológicas diferenciadas [2, 10].

Do ponto de vista dosimétrico, a diferença entre as doses de pico e vale constitui um dos principais parâmetros da radioterapia espacialmente fracionada, uma vez que influencia simultaneamente o controle tumoral e a preservação dos tecidos normais. Nas últimas décadas, diferentes modalidades de SFRT foram desenvolvidas, destacando-se as técnicas GRID e LATTICE, amplamente estudadas para o tratamento de tumores volumosos e de difícil manejo clínico [2, 5, 10].

3.4 A TÉCNICA GRID

A técnica GRID foi uma das primeiras formas de aplicação da radioterapia espacialmente fracionada [2, 5, 6]. Inicialmente, utilizava-se uma placa física de chumbo perfurada, semelhante a uma grelha, posicionada na saída dos equipamentos de raios X [2]. Essa estrutura bloqueava parte da radiação, permitindo a passagem do feixe apenas por regiões específicas e produzindo um padrão alternado de picos e vales de dose, como ilustrado na Figura 3.2.

Figura 3.2: Equipamento em forma de grelha responsável por gerar os efeitos de picos e vales



Fonte: Adaptado de Zhang *et al.* (2024) [5].

Historicamente, a GRID foi desenvolvida para possibilitar a administração de doses elevadas em tumores volumosos, nos quais a irradiação homogênea poderia resultar em toxicidade excessiva aos tecidos saudáveis adjacentes. Dessa forma, apenas determinadas regiões do tumor recebiam doses mais altas, enquanto outras áreas permaneciam relativamente poupadas [2, 5].

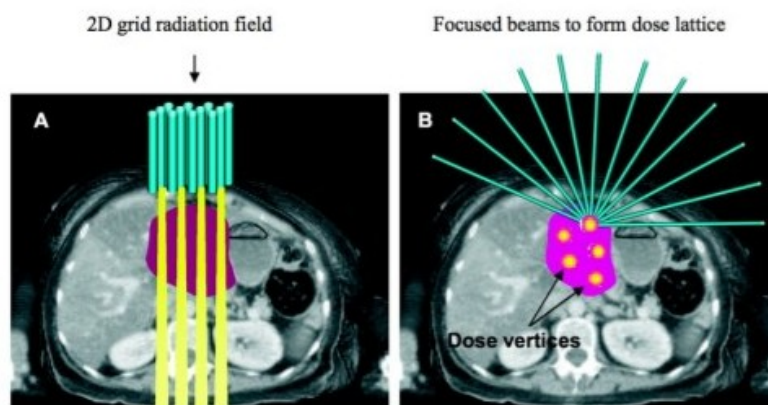
Do ponto de vista dosimétrico, a técnica GRID caracteriza-se por uma distribuição altamente heterogênea da dose, sendo a relação entre picos e vales um parâmetro importante para avaliar sua eficácia [2, 5]. Com a evolução dos aceleradores lineares (LINAC) e dos sistemas de planejamento radioterápico, essa técnica passou a ser implementada de forma virtual, permitindo maior precisão, flexibilidade e reprodutibilidade no tratamento [5].

A GRID tem sido especialmente estudada no tratamento de tumores volumosos e radio-resistentes, apresentando potencial para melhorar o controle tumoral com menor toxicidade em tecidos adjacentes quando comparada à radioterapia convencional [5, 10].

3.5 A TÉCNICA LATTICE

Com os avanços tecnológicos e computacionais, surgiu a técnica LATTICE, considerada uma evolução tridimensional da GRID [6, 7]. Diferentemente da abordagem bidimensional da GRID, a LATTICE utiliza a criação de volumes esféricos de alta dose, conhecidos como vértices, distribuídos estrategicamente no interior do tumor em um arranjo tridimensional, conforme representado na Figura 4 [6, 7].

Figura 3.3: Representação esquemática da distribuição de dose nas técnicas (A) GRID e (B) Lattice



Fonte: Adaptado de WU *et al.* (2017) [7].

Os vértices correspondem a pequenas regiões internas do tumor que recebem doses significativamente superiores à dose prescrita para o restante do volume. Entre essas regiões de alta dose permanecem áreas submetidas a doses mais baixas, preservando o padrão de picos e vales característico da radioterapia espacialmente fracionada [6, 7]. Essa configuração permite intensificar seletivamente a dose em regiões específicas do tumor, sem aumentar proporcionalmente a exposição dos tecidos normais adjacentes.

A técnica LATTICE é planejada por meio de sistemas modernos de planejamento radioterápico, utilizando técnicas avançadas como IMRT e VMAT, que permitem elevada precisão na modulação e conformação da dose [9]. Dessa forma, torna-se possível controlar com maior exatidão a localização, o tamanho e a intensidade dos vértices de alta dose, produzindo distribuições espaciais altamente adaptadas à geometria tumoral [6, 7, 8, 9, 10].

Estudos recentes indicam que a técnica LATTICE pode proporcionar melhor conformação da distribuição de dose em tumores volumosos, favorecendo o escalonamento seletivo da dose e reduzindo a exposição dos tecidos saudáveis circundantes. Além dos benefícios dosimétricos, essa abordagem tem sido associada à indução de respostas biológicas relevantes, como o efeito espectador (*bystander effect*), no qual células não diretamente irradiadas respondem a sinais emitidos por células irradiadas, e o efeito abscopal, caracterizado pela regressão de lesões tumorais localizadas fora do campo de tratamento devido à ativação de mecanismos imunológicos sistêmicos [6, 10].

Na prática clínica, a técnica LATTICE raramente é utilizada de forma isolada, sendo frequentemente combinada com outras modalidades terapêuticas, como radioterapia convencional, quimioterapia e cirurgia, compondo uma abordagem multimodal para o tratamento do câncer [6, 10].

Além dos aspectos físicos e dosimétricos, o crescente interesse pela radioterapia espacialmente fracionada está relacionado ao seu potencial de induzir respostas biológicas distintas daquelas observadas na radioterapia convencional. Entre os mecanismos mais investigados

destacam-se os efeitos espectador e abscopal, discutidos na seção seguinte.

3.6 EFEITOS BIOLÓGICOS RELACIONADOS À RADIOTERAPIA ESPACIALMENTE FRACIONADA

Embora a radioterapia tenha sido tradicionalmente compreendida a partir dos efeitos diretos da radiação sobre as células irradiadas, estudos realizados nas últimas décadas demonstraram que suas respostas biológicas podem se estender além da região que recebeu a dose de radiação. Nesse contexto, os efeitos espectador (*bystander effect*) e abscopal têm despertado crescente interesse científico, especialmente no âmbito da radioterapia espacialmente fracionada, devido ao potencial de contribuir para o controle tumoral por mecanismos que ultrapassam os efeitos físicos da deposição de dose [11, 12, 13].

3.7 EFEITO ESPECTADOR

O efeito espectador (*bystander effect*) corresponde às respostas biológicas observadas em células que não foram diretamente irradiadas, mas que recebem sinais provenientes de células irradiadas localizadas nas proximidades [11, 13].

Após a exposição à radiação, as células irradiadas podem liberar moléculas sinalizadoras associadas ao estresse celular, incluindo citocinas, espécies reativas de oxigênio e outros mediadores bioquímicos. Esses sinais podem alcançar células vizinhas através do meio extracelular ou através de junções comunicantes entre células, desencadeando diversas respostas biológicas [11, 13].

Entre os efeitos observados destacam-se apoptose, alterações na expressão gênica, instabilidade genética, mutações e modificações no funcionamento celular. Dessa forma, os efeitos da radiação não ficam restritos apenas às células diretamente atingidas pelo feixe, podendo se propagar para regiões adjacentes ao campo irradiado [11].

O efeito espectador apresenta relevância clínica por poder contribuir para o aumento da destruição tumoral. Entretanto, também pode estar associado a efeitos indesejáveis em tecidos normais, uma vez que alterações induzidas em células não irradiadas podem favorecer processos biológicos adversos, incluindo o surgimento de cânceres secundários ao longo do tempo [11, 13].

Além disso, estudos demonstram que o efeito espectador pode ocorrer mesmo em baixas doses de radiação, reforçando a complexidade das respostas biológicas induzidas pela radioterapia e evidenciando que os efeitos celulares não dependem exclusivamente da deposição direta de energia pela radiação [11].

3.8 EFEITO ABSCOPAL

O efeito abscopal caracteriza-se pela ocorrência de respostas antitumorais em regiões do organismo que não receberam radiação diretamente, após a irradiação localizada de um tumor [12, 13]. Diferentemente do efeito espectador, que ocorre em células próximas ao local irradiado, o efeito abscopal manifesta-se em locais distantes do campo de tratamento e está fortemente associado à ativação do sistema imunológico [12, 13].

Quando a radiação provoca a destruição de células tumorais, ocorre a liberação de fragmentos celulares e antígenos tumorais que podem ser reconhecidos por células apresentadoras de antígeno, especialmente as células dendríticas. Esse processo promove a ativação de linfócitos T citotóxicos, que passam a reconhecer e atacar células tumorais presentes em outras regiões do organismo [12, 13].

Na radioterapia espacialmente fracionada, particularmente nas técnicas GRID e LATTICE, acredita-se que esse fenômeno possa ser favorecido pela distribuição heterogênea da dose. Nas regiões de pico, onde são administradas doses elevadas, ocorre intensa destruição tumoral e maior liberação de antígenos. Simultaneamente, as regiões de vale podem preservar parte da arquitetura tecidual e de componentes do sistema imunológico, potencializando a resposta imunológica desencadeada pelo tratamento [12, 13].

Apesar de ainda ser considerado um fenômeno relativamente raro na prática clínica, o efeito abscopal tem despertado grande interesse científico, especialmente em estratégias que combinam radioterapia e imunoterapia. Nessas situações, a ativação imunológica induzida pela radiação pode ser amplificada, aumentando o potencial de resposta antitumoral sistêmica [13].

Dessa forma, os efeitos espectador e abscopal demonstram que os impactos biológicos da radiação vão além das células diretamente irradiadas. Na radioterapia espacialmente fracionada, esses mecanismos têm despertado grande interesse científico, pois podem contribuir tanto para o aumento da resposta tumoral quanto para a preservação parcial dos tecidos saudáveis. Assim, técnicas como GRID e LATTICE vêm sendo estudadas não apenas por suas características físicas e dosimétricas, mas também pelo seu potencial biológico e imunológico no tratamento de tumores volumosos.

4 METODOLOGIA

Com o objetivo de avaliar diferentes modalidades de radioterapia no tratamento de um caso de sarcoma de tecidos moles, utilizou-se o sistema de planejamento Eclipse (Varian Medical Systems, Palo Alto, CA, EUA) para simular diferentes técnicas de planejamento radioterápico. O acesso ao sistema de planejamento foi feito de forma remota e este foi disponibilizado pelo Laboratório de Dosimetria Aplicada à Radioterapia Clínica, localizado no Departamento de Física da Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo, *campus* Ribeirão Preto.

4.1 BASE DE DADOS

As imagens utilizadas neste estudo foram obtidas a partir do banco de dados público *The Cancer Imaging Archive* (TCIA), especificamente da coleção TCGA-SARC, composta por exames de pacientes diagnosticados com sarcoma de tecidos moles [15].

Foi selecionado um caso clínico de sarcoma de tecido mole localizado na região da panturrilha, cujos exames tomográficos foram utilizados para a realização dos planejamentos radioterápicos.

Os dados foram importados para o sistema de planejamento, já contendo o delineamento do volume tumoral e das estruturas anatômicas de interesse disponibilizados juntamente com o conjunto de imagens. O PTV foi definido com base na extensão tumoral identificada por imagens de ressonância magnética, acrescida de uma margem aproximada de 2 cm nas direções radial e longitudinal, conforme recomendado para sarcomas de tecidos moles [8].

Também foram considerados os OARs, incluindo estruturas ósseas e tecidos moles localizados nas proximidades da região alvo. Adicionalmente, por se tratar de um tumor localizado próximo à superfície corporal, foi mantida uma distância mínima de 0,5 cm entre o PTV e a superfície da pele, com o objetivo de favorecer o equilíbrio eletrônico e proporcionar adequada cobertura do volume-alvo.

4.2 PLANEJAMENTO RADIOTERÁPICOS

Foram desenvolvidos três planejamentos distintos para fins comparativos: um planejamento utilizando a técnica VMAT, um planejamento simulando radioterapia GRID e um planejamento simulando radioterapia LATTICE [5, 6, 7, 16]. Todas as técnicas foram simuladas utilizando um feixe de fótons de 6 MV, algoritmo de cálculo de dose AAA (*Anisotropic Analytical Algorithm*), disponível no sistema Eclipse, e dose total de 50 Gy distribuídos em 25 frações.

As especificações de cada planejamento são descritas a seguir:

4.2.1 PLANEJAMENTO VMAT

O planejamento convencional foi elaborado utilizando a técnica de tratamento VMAT, buscando maior cobertura do PTV e redução da dose nos órgãos de risco. Foi utilizado um único arco completo com rotação de 181° a 45° no sentido horário (SH) e colimador posicionado a 0° .

Durante a etapa de planejamento foram avaliadas diferentes configurações de tratamento, sendo selecionado o plano que apresentou melhor cobertura do volume alvo e menor exposição dos tecidos adjacentes. Como critério de aceitação, adotou-se que pelo menos 95% do PTV recebesse 100% da dose prescrita, em conformidade com os critérios de cobertura normalmente empregados em radioterapia externa.

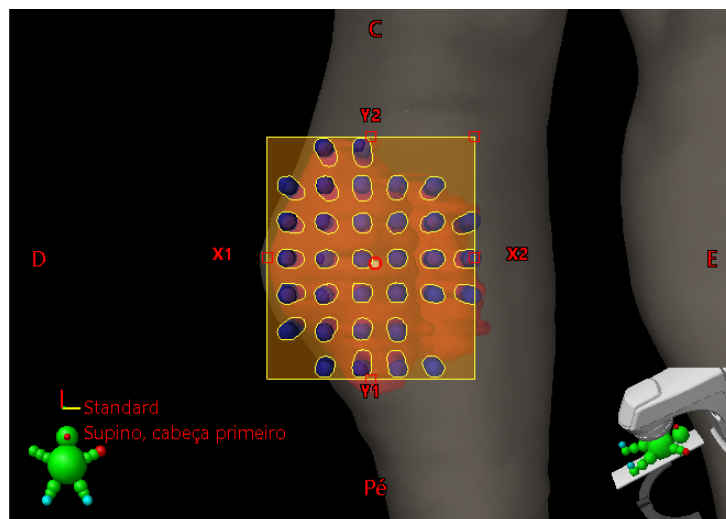
Para o órgão em risco correspondente às estruturas ósseas, foi adotada a recomendação de que a dose média permanecesse inferior a 37 Gy, conforme descrito nas diretrizes para tratamento de sarcomas de tecidos moles [8].

4.2.2 PLANEJAMENTO DE RADIOTERAPIA ESPACIALMENTE FRACIONADA

Técnica GRID

Para a simulação da técnica GRID foi criado um bloco no campo de tratamento simulado com uma grade virtual composta por múltiplas aberturas aproximadamente circulares, com 1 cm de diâmetro, distribuídas regularmente sobre a projeção do volume alvo, e uma estrutura de blindagem virtual responsável por bloquear as regiões entre as aberturas (vide Figura 4.1). As aberturas foram espaçadas uniformemente em intervalos de 1 cm, formando um padrão bidimensional semelhante aos colimadores GRID tradicionalmente utilizados na radioterapia espacialmente fracionada [5, 6, 7, 2].

Figura 4.1: Bloco simulado no tratamento com o campo anterior, representando uma grade virtual composta por aberturas circulares de 1 cm de diâmetro utilizada na simulação da radioterapia espacialmente fracionada do tipo GRID



Fonte: Elaborada pela autora.

O planejamento foi realizado utilizando dois campos opostos, posicionados em 0° e 180°. O bloco simulando a grade de tratamento ilustrado foi confeccionado para o campo anterior (0°) e o campo posterior foi gerado automaticamente com a ferramenta do sistema de criação de campo oposto (180°). Essa configuração permitiu a formação de regiões de alta deposição de dose (picos) intercaladas por regiões de menor dose (vales), característica fundamental da técnica GRID.

Técnica LATTICE

Para a simulação da técnica LATTICE foram criadas dez estruturas esféricas (vértices), as quais tinham a função de receber alta dose, com diâmetro de 1,5 cm, distribuídas no interior do volume tumoral. O posicionamento das esferas seguiu as recomendações descritas por [16],

respeitando uma distância mínima de 3 cm entre os centros das esferas em qualquer direção e mantendo uma separação mínima de 1 cm entre a superfície das esferas e os órgãos de risco adjacentes [16].

A distribuição das esferas foi realizada de forma a ocupar adequadamente o volume tumoral, respeitando simultaneamente os critérios geométricos estabelecidos e a anatomia do caso estudado. A Figura 4.2 apresenta a distribuição final das esferas.

Figura 4.2: Representação tridimensional da distribuição das esferas no interior do volume tumoral durante o planejamento da técnica LATTICE



Fonte: Elaborada pela autora

O planejamento foi realizado utilizando quatro semi arcos VMAT com fótons de 6 MV, colimador posicionado a 0°, nas seguintes configurações: 45° a 181° no sentido anti-horário (SAH), 20° a 210° no sentido anti-horário, 181° a 45° no sentido horário (SH) e 230° a 350° no sentido horário.

Para auxiliar o processo de otimização inversa, foram criadas estruturas auxiliares concêntricas ao redor dos vértices, seguindo a metodologia descrita na literatura, utilizadas para controlar o decaimento da dose ao redor dos vértices e favorecer a formação dos vales de dose característicos da técnica [16]. As esferas de pico receberam o objetivo mínimo correspondente a 100% do volume recebendo 100% da dose prescrita. Adicionalmente, foram criadas estruturas de controle interno (z_{IC}), intermediário (z_{MC}) e externo (z_{OC}), com restrições superiores de dose correspondentes a 98%, 50% e 40% da dose prescrita, respectivamente. Essas estruturas tiveram como finalidade promover gradientes de dose adequados entre as regiões de pico e as áreas adjacentes, favorecendo a característica espacialmente fracionada da técnica [16].

Embora não tenham sido aplicadas restrições específicas de dose aos órgãos de risco durante a otimização, buscou-se minimizar a exposição dos tecidos saudáveis adjacentes sempre que possível, sem comprometer as características da técnica.

4.3 AVALIAÇÃO DOSIMÉTRICA

Após a elaboração dos planejamentos radioterápicos com as técnicas VMAT, GRID e LATTICE, foi realizada uma análise comparativa das distribuições de dose obtidas em cada modalidade de tratamento.

A avaliação dosimétrica foi conduzida por meio da análise visual das distribuições de dose, dos histogramas dose-volume (DVH) e dos perfis de dose extraídos do sistema de planejamento. Essas ferramentas permitiram avaliar a distribuição espacial da dose e o comportamento dos gradientes de dose em cada técnica estudada.

Os resultados obtidos foram organizados, o que permitiu uma comparação qualitativa entre as técnicas avaliadas.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

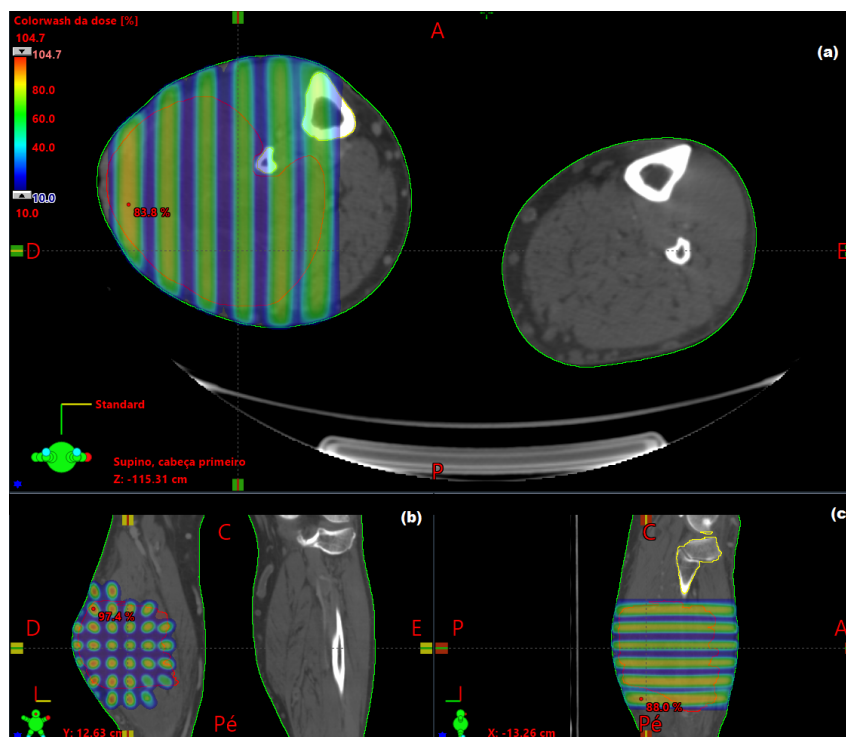
5.1 DISTRIBUIÇÃO DE DOSE

Após a simulação dos planejamentos radioterápicos, foi possível obter os mapas de distribuição de dose correspondentes às diferentes técnicas avaliadas. A Figura 5.1 apresenta as distribuições de dose dos planejamentos VMAT, GRID e LATTICE. Em todas as imagens, o contorno em vermelho representa o volume tumoral correspondente ao sarcoma.

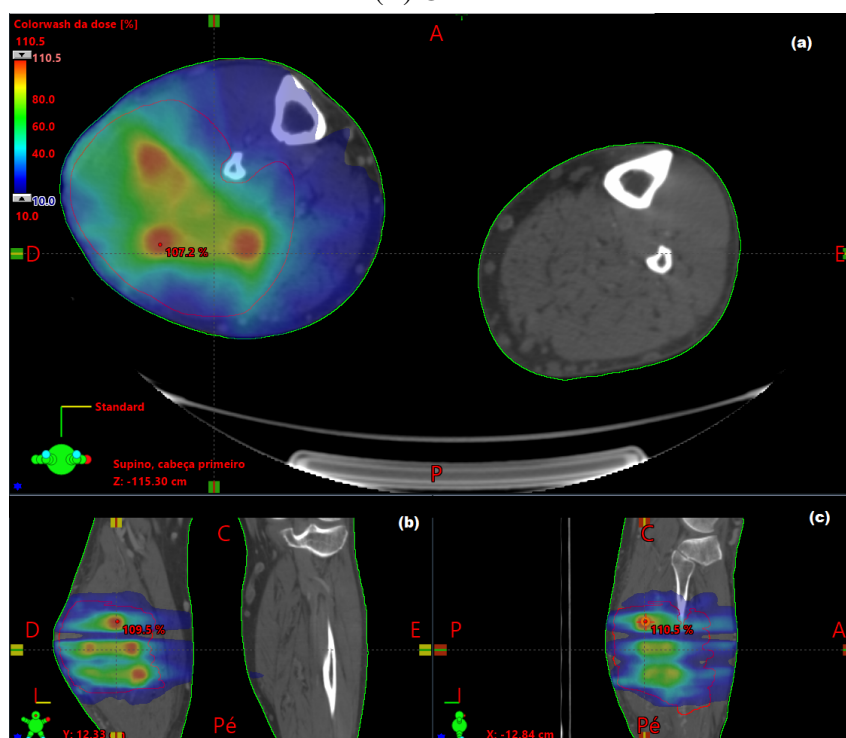
Figura 5.1: Representação da distribuição de dose dos planejamentos (A) VMAT, (B) GRID e (C) LATTICE, nos cortes (a) axial, (b) coronal e (c) sagital do volume tumoral.



(A) VMAT



(B) GRID



(C) LATTICE

Fonte: Elaborada pela autora.

Na Figura 5.1 (A), referente ao planejamento VMAT, observa-se uma deposição de dose relativamente homogênea ao longo de todo o volume alvo (PTV convencional), com doses máxima 109,2%, mínima 87,5% e média 103,3%. A distribuição apresenta cobertura uniforme do tumor e gradientes de dose mais suaves em direção aos tecidos adjacentes, o que é esperado

para técnicas convencionais de radioterapia. Esse resultado demonstra que o planejamento atendeu ao objetivo principal do VMAT, que consiste em maximizar a cobertura tumoral de forma homogênea, preservando simultaneamente as estruturas sadias próximas à região irradiada.

Ademais, a Figura 5.1 (B) evidencia o comportamento característico da técnica GRID. Observa-se uma distribuição de dose heterogênea, marcada pela presença de regiões de alta dose (picos) intercaladas por regiões de menor deposição de dose (vales), com valores de dose máxima, mínima e média sendo 104%, 3% e 36,1% respectivamente, considerando o PTV convencional. Esse padrão decorre diretamente da utilização da grade virtual desenvolvida para o planejamento e representa uma das principais características da radioterapia espacialmente fracionada. A alternância entre picos e vales permite a administração de doses mais elevadas em regiões específicas do tumor, reduzindo simultaneamente a exposição de parte dos tecidos irradiados, favorecendo a preservação dos tecidos sadios circundantes.

De maneira semelhante, a técnica LATTICE, apresentada na Figura 5.1 (C), também produziu uma distribuição heterogênea, com dose máxima 110,5%, dose mínima 1,7% e dose média 39,7%, considerando o PTV convencional. Entretanto, diferentemente da GRID, os focos de alta dose foram distribuídos tridimensionalmente no interior do volume tumoral por meio dos vértices de dose elevada. Como resultado, observa-se a formação de múltiplas regiões de alta dose cercadas por áreas de menor dose, permitindo um controle espacial mais refinado da distribuição de dose dentro do tumor. Essa característica faz com que a técnica LATTICE seja frequentemente descrita como uma evolução tridimensional da técnica GRID para o tratamento de tumores volumosos.

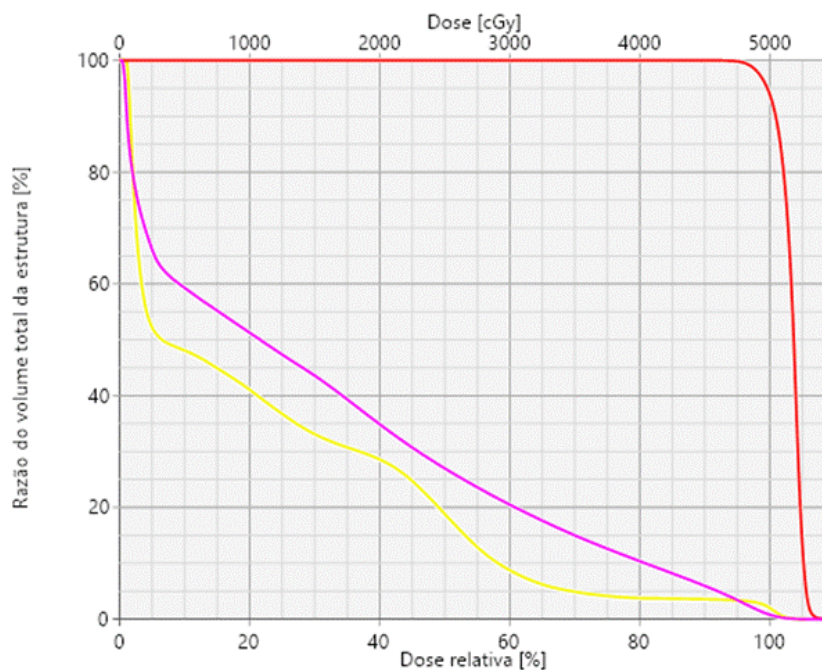
De forma geral, os resultados evidenciam diferenças importantes entre a radioterapia convencional e as técnicas espacialmente fracionadas. Enquanto o VMAT prioriza a homogeneidade da dose em todo o volume alvo, as técnicas GRID e LATTICE baseiam-se em distribuições intencionalmente heterogêneas, explorando a formação de regiões de picos e vales, como estratégia para concentrar doses mais elevadas do que na radioterapia convencional, sem afetar de significativamente os tecidos saudáveis. A análise quantitativa dessas diferenças pode ser realizada por meio dos histogramas dose-volume (DVHs), apresentados na seção seguinte.

5.2 HISTOGRAMA DE DOSE-VOLUME (DVH)

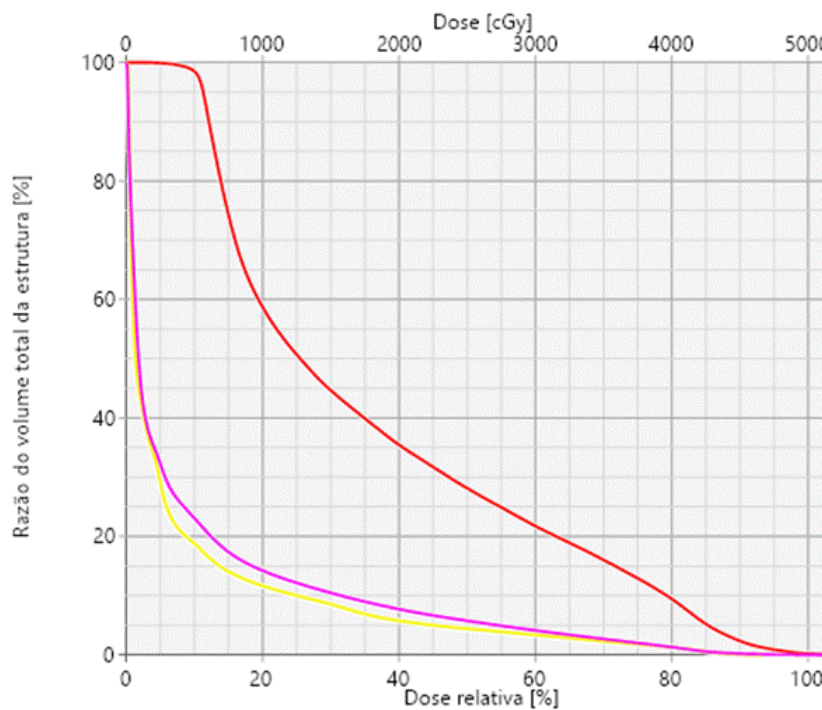
Além da análise visual da distribuição de dose, outra forma de avaliar o comportamento dos planejamentos radioterápicos é por meio do Histograma Dose-Volume (DVH – *Dose Volume Histogram*). Essa ferramenta permite verificar como a dose prescrita é distribuída entre o volume tumoral e os órgãos de risco, fornecendo informações quantitativas sobre a cobertura do alvo e a preservação dos tecidos sadios.

Na Figura 5.3 são apresentados os DVHs obtidos para os três planejamentos avaliados. Nesses gráficos, a curva vermelha representa o volume tumoral correspondente ao sarcoma, enquanto as curvas amarela e rosa representam, respectivamente, os ossos e os tecidos moles, considerados como órgãos de risco.

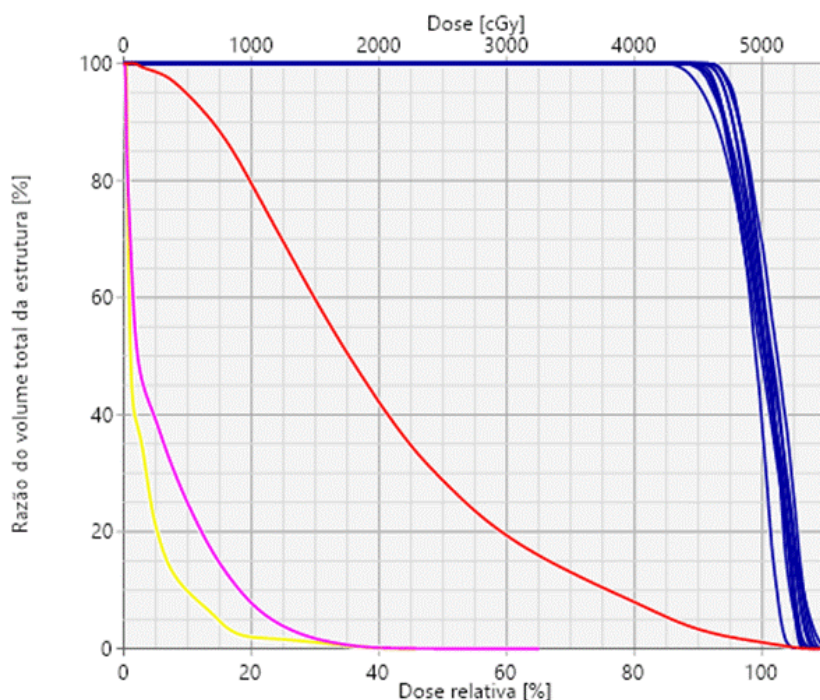
Figura 5.3: Representação dos Diagramas de Dose-Volume dos planejamentos (A) VMAT, (B) GRID e (C) LATTICE. Considere que o PTV é representado pela curva vermelha e que os OARs são representados pelas curvas amarela (ossos) e rosa (tecidos moles). No caso (C) as curvas em azul representam os vértices.



(A) VMAT



(B) GRID



(C) LATTICE

Fonte: Elaborada pela autora.

Conforme observado na Figura 5.3 (A), referente ao planejamento VMAT, verifica-se elevada cobertura do volume tumoral pela dose prescrita de 50 Gy. A curva do sarcoma apresenta comportamento característico de distribuições homogêneas de dose, evidenciando que pelo menos 95 do volume recebeu 100% da dose prescrita, conforme estabelecido nos critérios de planejamento adotados neste estudo.

Por outro lado, os DVHs das técnicas espacialmente fracionadas, apresentados nas Figuras 5.3 (B) e (C), demonstram comportamento distinto, em que 95% do volume recebeu 11,2% e 9,6% da dose, nas técnicas GRID e LATTICE, respectivamente. Nessas técnicas, a cobertura homogênea de todo o volume tumoral não constitui o objetivo principal do planejamento, uma vez que a deposição de dose ocorre de forma seletiva em regiões específicas do tumor. Como consequência, observa-se uma redução da cobertura global do volume tumoral quando comparada ao planejamento VMAT, refletindo a natureza heterogênea das técnicas GRID e LATTICE.

No caso específico da técnica LATTICE, observa-se ainda a presença das curvas correspondentes às dez esferas de alta dose, representadas em azul escuro. Verifica-se que parcela significativa do volume dessas estruturas recebe a dose prescrita, indicando que os objetivos de otimização foram adequadamente atingidos. Esse comportamento está de acordo com a metodologia descrita na literatura para a implementação da técnica LATTICE, na qual se concentram elevadas doses em regiões específicas do volume tumoral [16].

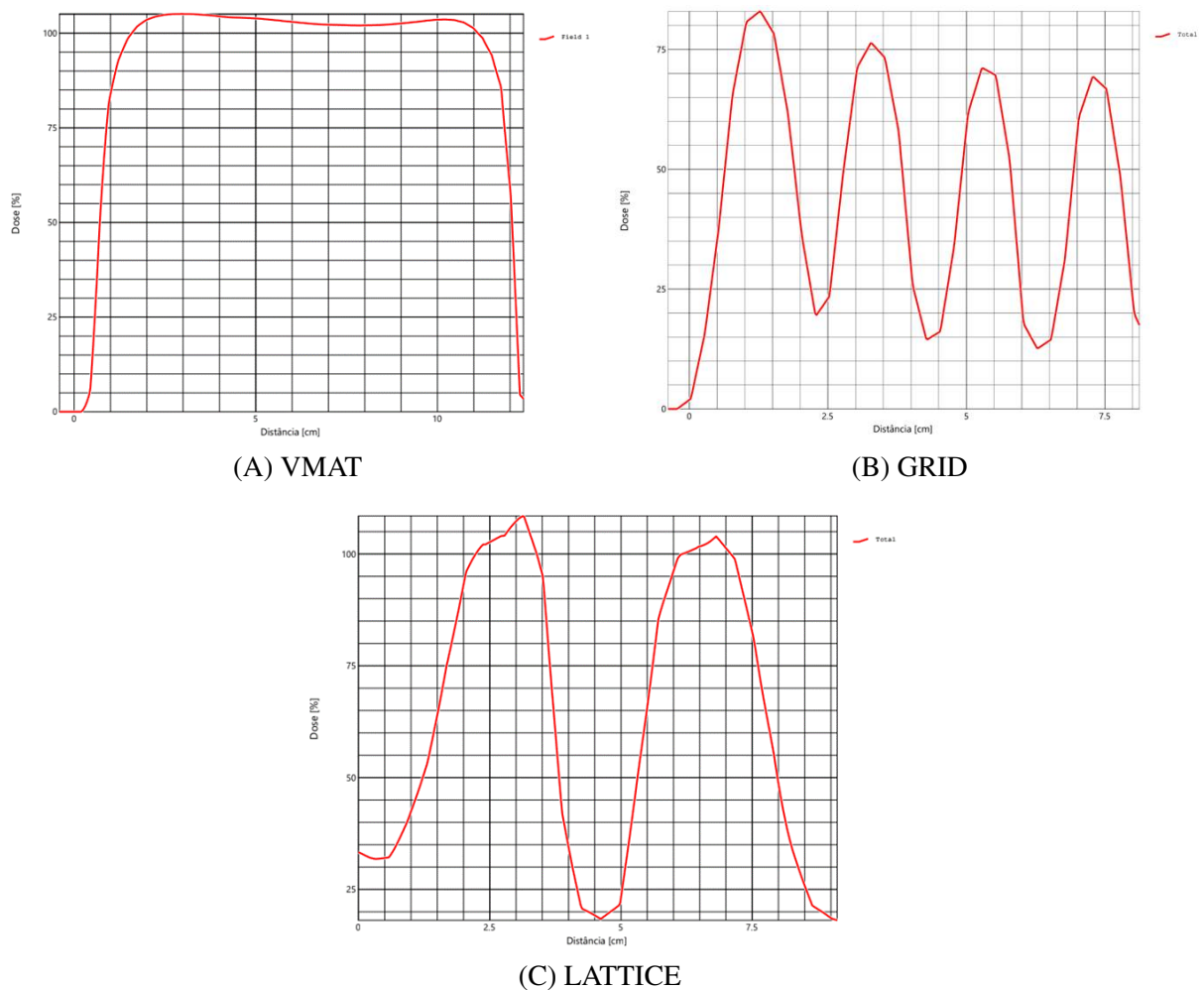
Paralelamente, observa-se que os órgãos de risco receberam doses inferiores nos planejamentos GRID e LATTICE quando comparados ao VMAT. Esse resultado pode ser atribuído à característica espacialmente fracionada dessas técnicas, que restringe a deposição de altas e

baixas doses em regiões selecionadas do tumor, contribuindo para uma menor exposição dos tecidos sadios adjacentes.

5.3 PERFIL DE DOSE

Por meio da ferramenta "Perfil de Dose" disponível no sistema de planejamento, foi possível avaliar a variação da dose ao longo de uma determinada distância nos três planejamentos simulados. Essa análise complementa as distribuições de dose e os DVHs apresentados anteriormente, permitindo visualizar os gradientes de dose produzidos por cada técnica.

Figura 5.5: Representação do perfil de dose dos casos planejados em (A) VMAT, (B) GRID e (C) LATTICE



Fonte: Elaborada pela autora.

Na Figura 5.5 (A), referente ao planejamento VMAT, observa-se um perfil de dose relativamente uniforme, com pequenas variações de dose ao longo da região irradiada. Esse comportamento é compatível com a proposta da radioterapia convencional, que busca distribuir a dose de forma homogênea ao longo de todo o volume alvo, minimizando regiões de superdosagem ou subdosagem. Dessa forma, esse resultado evidencia a capacidade dessa técnica

de proporcionar uma distribuição dosimétrica homogênea contribuindo para a preservação dos tecidos saudáveis circundantes.

Por outro lado, a Figura 5.5 (B) evidencia o comportamento característico da técnica GRID. O perfil apresenta oscilações periódicas de grande amplitude, decorrentes da alternância entre regiões de alta dose (picos) e de baixa dose (vales) produzidas pela grade virtual. A presença desses gradientes acentuados evidencia a elevada heterogeneidade espacial da técnica e confirma a formação do padrão de irradiação esperado para a radioterapia GRID. Essa técnica por já possuir maior padronização das grades quanto a tamanho e distância entre os picos e vales possui uma deposição de dose mais regular em relação ao local onde se posicionará os picos e vales.

De maneira semelhante, a Figura 5.5 (C) mostra que a técnica LATTICE também produz uma distribuição heterogênea da dose, porém com uma configuração distinta da observada na GRID. Os picos de dose estão associados às esferas de alta dose distribuídas no interior do volume tumoral, enquanto as regiões intermediárias correspondem aos vales de dose. Diferentemente da GRID, em que os picos apresentam distribuição mais regular, a LATTICE permite posicionar as regiões de alta dose de forma tridimensional e personalizada para cada tratamento, adaptando-se à geometria e volume tumoral.

Além da presença dos picos e vales característicos das técnicas espacialmente fracionadas, observa-se que o planejamento GRID apresentou regiões de pico e vale correspondentes a aproximadamente 85% e 20% da dose prescrita, respectivamente. Já para a técnica LATTICE, foram observados valores aproximados de 107% para os picos e 17% para os vales. Em ambos os casos, as regiões de vale permaneceram abaixo de 40% da dose prescrita, em concordância com recomendações descritas na literatura para planejamentos espacialmente fracionados [16]. Esses resultados indicam a formação de gradientes de dose acentuados, característica desejável nessas técnicas por permitir a concentração de altas doses em regiões específicas do tumor, preservando simultaneamente áreas adjacentes submetidas a menores níveis de irradiação e potencialmente favorecendo a incidência de efeitos como o Espectador e o Abscopal, responsáveis pela morte celular em regiões não irradiadas com a dose plena do tratamento.

De forma geral, os perfis de dose evidenciam diferenças marcantes entre as técnicas avaliadas. Enquanto o VMAT apresentou comportamento compatível com uma distribuição homogênea de dose, as técnicas GRID e LATTICE produziram perfis caracterizados por sucessivos picos e vales, refletindo a natureza espacialmente fracionada desses tratamentos. A observação desses perfis reforça os resultados apresentados nas distribuições de dose e nos DVHs, confirmando que as técnicas espacialmente fracionadas concentram doses elevadas em regiões específicas do volume tumoral, preservando áreas adjacentes com menores níveis de irradiação, enquanto as técnicas de radioterapia convencional buscam uma entrega homogênea ao longo do volume tumoral, preservando as áreas adjacentes com níveis suportáveis de irradiação e reduzindo a probabilidade de efeitos adversos nos tecidos saudáveis.

6 CONCLUSÃO

A radioterapia espacialmente fracionada tem despertado um crescente interesse devido à sua capacidade de administrar altas doses de radiação de forma seletiva dentro do volume tumoral. Além disso, a partir dessas técnicas, o tratamento de tumores volumosos e com regiões hipóxicas se tornou mais fácil, por permitir administrar altas doses de maneira heterogênea sem afetar significativamente os tecidos sadios adjacentes. Nesse contexto, este trabalho permitiu comparar, por meio de simulações computacionais, as características dosimétricas das técnicas VMAT, GRID e LATTICE aplicadas a um caso de sarcoma de tecidos moles na panturrilha.

A análise dos planejamentos evidenciou que cada técnica apresenta uma proposta distinta de deposição de dose. Enquanto o VMAT busca uma cobertura homogênea de todo o volume tumoral, as técnicas GRID e LATTICE baseiam-se na criação intencional de regiões de alta e de baixa dose, resultando em distribuições heterogêneas, características da radioterapia espacialmente fracionada. Essas diferenças puderam ser observadas de forma consistente nas distribuições de dose, nos histogramas dose-volume e nos perfis de dose avaliados, em que cada perfil de dose caracterizou a deposição de maneira específica no volume tumoral, a VMAT com a cobertura majoritariamente homogênea, GRID e LATTICE com regiões de picos e vales que evidenciam a cobertura heterogênea das doses respectivas das respectivas técnicas.

Entre as técnicas espacialmente fracionadas, observou-se que a LATTICE permitiu maior controle da localização das regiões de alta dose no interior do tumor, possibilitando uma distribuição tridimensional mais personalizada quando comparada à GRID. Esse aspecto demonstra como os avanços nos sistemas de planejamento radioterápico têm possibilitado o desenvolvimento de abordagens cada vez mais sofisticadas para o tratamento de tumores volumosos.

Além dos resultados obtidos, o desenvolvimento deste trabalho contribuiu para a compreensão dos princípios físicos e dosimétricos envolvidos no planejamento radioterápico, permitindo o contato com técnicas inovadoras em investigação na literatura científica. Dessa forma, o estudo atingiu seu objetivo de comparar diferentes modalidades de tratamento e compreender suas principais características, vantagens e aplicações potenciais.

Referências

- [1] SEGRETO, Helena Regina Comodo (Coord.). **Radiobiologia: da bancada à clínica**. São Paulo: Scortecci, 2022.
- [2] TEODOROVIĆ, Ivana et al. Spatially fractionated radiotherapy (GRID): review of clinical applications and radiobiological mechanisms. **Vojnosanitetski pregled**, v. 67, n. 4, p. 311–318, 2010.
- [3] OKUNO, Emiko; YOSHIMURA, Elisabeth Mateus. **Física das radiações**. São Paulo: Oficina de Textos, 2010.
- [4] SOCIEDADE BRASILEIRA DE RADIOTERAPIA (SBRT). **História da Radioterapia**. 2025. Disponível em: <https://sbradioterapia.com.br/pacientes-e-leigos/historia-da-radioterapia/historia-da-radioterapia/>. Acesso em: 9 jun. 2026.
- [5] ZHANG, Hualin et al. Dosimetric Validation for Prospective Clinical Trial of GRID Collimator-Based Spatially Fractionated Radiation Therapy: Dose Metrics Consistency and Heterogeneous Pattern Reproducibility. **International Journal of Radiation Oncology Biology Physics**, 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijrobp.2023.08.061>.
- [6] IORI, Federico et al. Lattice Radiation Therapy in clinical practice: A systematic review. **Clinical and Translational Radiation Oncology**, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ctro.2022.100569>.
- [7] WU, Xiaodong et al. On Modern Technical Approaches of Three-Dimensional High-Dose Lattice Radiotherapy (LRT). **Cureus**, v. 9, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.7759/cureus.9>.
- [8] ROHANI, S. et al. ESTRO clinical practice guideline on radiotherapy for adult soft tissue sarcoma of the extremities and trunk wall – Endorsed by ASTRO. **Radiotherapy and Oncology**, 2024.
- [9] GOMES, Jheferson Salvador da Silva et al. Radioterapia Lattice: um estudo comparativo de viabilidade da técnica IMRT com a VMAT. **Revista Brasileira de Física Médica**, v. 19, 2025. Disponível em: <https://doi.org/10.29384/rbfm.2025.v19.19849001769>.
- [10] AHMED, Mansoor M. et al. Optimizing GRID and Lattice Spatially Fractionated Radiation Therapy: Innovative Strategies for Radioresistant and Bulky Tumor Management. **Seminars in Radiation Oncology**, 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.semradonc.2024.05.002>.
- [11] NAJAFI, M. et al. The mechanisms of radiation-induced bystander effect. **Journal of Radiation Research**, 2015.

- [12] RODRIGO-RUIZ, María E. et al. Immunological mechanisms responsible for radiation-induced abscopal effect. **Trends in Immunology**, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.it.2018.06.001>.
- [13] DAGUENET, Elisabeth et al. Radiation-induced bystander and abscopal effects: important lessons from preclinical models. **British Journal of Cancer**, 2020.
- [14] INTERNATIONAL JOURNAL OF RADIATION ONCOLOGY. Grid Spatially Fractionated Radiation Therapy for Bulky Tumors: A Large Single Institution Experience. **International Journal of Radiation Oncology**, 2025.
- [15] ROCHE, C.; BONACCIO, E.; FILIPPINI, J. The Cancer Genome Atlas Sarcoma Collection (TCGA-SARC). **The Cancer Imaging Archive**, 2016. DOI: 10.7937/K9/TCIA.2016.CX6YLSUX.
- [16] GRAMS, Michael P. et al. VMAT Grid Therapy: A Widely Applicable Planning Approach. **Practical Radiation Oncology**, v. 11, n. 3, p. e339-e347, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.prro.2020.10.007>.



GATOS INSTÁVEIS

Espectroscopia do harmônio em um modelo não
relativístico

Manuella Oliveira Rodrigues

Orientadora: Profa. Dra. Patrícia Camargo Magalhães
Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de
Campinas

Espectroscopia do Charmônio em um Modelo Não Relativístico

Spectroscopy of Charmonium in a Nonrelativistic Model

Manuella Oliveira Rodrigues

Trabalho de Conclusão de Curso

Orientadores Prof.^a Dra. Patrícia Camargo Magalhães (Unicamp) e
Prof. Lucas Aurélio Quitakava Ferreira da Silva (Mestrando Unicamp)

Abstract

This monograph aims to investigate the formation of heavy-quark bound states, with emphasis on the charmonium system ($c\bar{c}$), by solving the Schrödinger equation with the Cornell potential. To this end, a progressive review of fundamental quantum mechanical systems admitting analytical solutions was first carried out. The Schrödinger equation was solved for three different potentials: the infinite square well, the quantum harmonic oscillator, and the hydrogen atom. These studies provide the theoretical and mathematical foundation required for the investigation of more complex systems.

Subsequently, the Schrödinger equation was solved numerically for the charmonium system, composed of a charm quark and its antiquark ($c\bar{c}$), using the Cornell potential. This potential combines a Coulomb-like interaction, dominant at short distances, with a linear confinement term that describes the long-range behavior of the strong interaction between quarks. The numerical solution was obtained using the finite element method implemented in the *NDEigensystem* function of the *Mathematica* software.

Despite the limitations inherent to a non-relativistic treatment, the calculated results show excellent agreement with the available experimental data, demonstrating that the adopted model provides an effective description of the charmonium bound-state spectrum. Finally, possible extensions of the model are discussed, including the incorporation of hyperfine interactions.

Keywords: Charmonium; Cornell potential;

Resumo

Esta monografia tem como propósito investigar a formação de estados ligados de quarks pesados, com ênfase no sistema de charmônio ($c\bar{c}$), a partir da equação de Schrodinger associada ao potencial de Cornell. Para isso, foi feita inicialmente uma revisão gradual de problemas clássicos da Mecânica Quântica que admitem soluções analíticas. A equação de Schrodinger foi resolvida com os diferentes potenciais: o poço de potencial infinito, o oscilador harmônico e o átomo de hidrogênio. Estabelecendo a base teórica e matemática necessária para a abordagem de sistemas mais complexos.

Na sequência, solucionou-se a equação para descrever o charmônio, um sistema composto por um par de quark e antiquark $c\bar{c}$, usando o potencial de Cornell. Esse potencial inclui, além da atração coulombiana entre cargas opostas, um termo que vem da interação mais fundamental entre os quarks. Para isso, foi utilizado o método dos elementos finitos implementado pela função *NDEigensystem* do software Mathematica. Os resultados obtidos, apesar das limitações inerentes à abordagem não relativística, apresentam excelente concordância com dados experimentais disponíveis. Isso indica que o modelo não relativístico é eficaz na descrição da estrutura dos estados ligados de charmônio.

Por fim, são discutidas possíveis extensões do modelo, incluindo a incorporação de interações hiperfinas.

Palavras Chave: Charmônio; Potencial de Cornell;

Agradecimentos

Aos meus pais, Rafael Silva Rodrigues e Valéria Fabrícia de Oliveira, pelo apoio incondicional, por abdicarem dos seus desejos pessoais em prol da realização dos meus sonhos, pelo incentivo constante e compreensão ao longo de toda a minha trajetória acadêmica. Aos meus amigos e familiares, meu sincero agradecimento pela companhia, apoio e pelos momentos de descontração, que foram essenciais para manter o equilíbrio durante este processo.

Aos meus orientadores, Dra. Patrícia Camargo Magalhães e Prof. Lucas Aurélio Quitakava Ferreira da Silva, expresse minha profunda gratidão pela orientação, paciência, dedicação e pelos valiosos ensinamentos, além da grande ajuda para o desenvolvimento e escrita deste trabalho.

Aos tutores, Profs. Drs. André Monteiro Paschoal, Leonardo de Lima e Ricardo D'Elia Matheus, bem como o monitor Prof. Dr. Fabrício Marques do Carmo, por toda a educação e conhecimentos dados durante os anos iniciais desse projeto, agradeço infinitamente por me mostrarem a beleza e grandiosidade do mundo acadêmico.

Ao Instituto Principia e à Escola de Talentos, agradeço pela estrutura oferecida, pelo ambiente acadêmico e pelas oportunidades que contribuíram significativamente para a minha formação. Foi através deste projeto que surgiu e se consolidou minha paixão pela Física, tornando esta experiência ainda mais significativa para o meu desenvolvimento pessoal e acadêmico.

À minha turma, Gatos Instáveis, que produziram seus próprios projetos, mas em conjunto comigo, a nossa convivência enriquecedora e compartilhamento mútuo de dificuldades e evoluções foi crucial para a construção desse trabalho, agradeço por não desistirem, assim como eu também não desisti.

Por fim, agradeço a todos que, de alguma forma, contribuíram direta ou indiretamente para a realização do meu TCC.

Sumário

1	Introdução	1
2	Soluções da Equação de Schrodinger para Sistemas Quânticos	6
2.1	Poço de Potencial Infinito	7
2.2	Oscilador Harmônico Quântico	10
2.3	Solução Analítica do átomo de Hidrogênio	13
2.3.1	A Equação de Schrodinger em coordenadas esféricas	14
2.3.2	Solução Angular e os Harmônicos Esféricos	15
2.3.3	Solução Radial	16
3	Solução Numérica pelo Método dos Elementos Finitos	19
3.1	Solução Numérica do Átomo de Hidrogênio	19
4	Charmônio: um estado ligado $c\bar{c}$	22
4.1	Potencial de Cornell	23
4.2	Solução Numérica do Charmônio	25
4.3	Resultados	26
5	Considerações Finais	32
6	Bibliografia	35

Introdução

A física de partículas é a área que busca compreender os constituintes fundamentais da matéria e suas interações. A teoria moderna (chamada de modelo padrão) busca explicar todos os fenômenos da física de partículas em termos das propriedades e interações das 4 forças fundamentais da natureza que regem o universo [1]. Cada uma dessas forças da natureza (por excessão apenas da gravidade) é mediada por uma partícula, os bósons. Que por essa característica recebem o nome de partículas mensageiras.

Modelo Padrão das Partículas Elementares

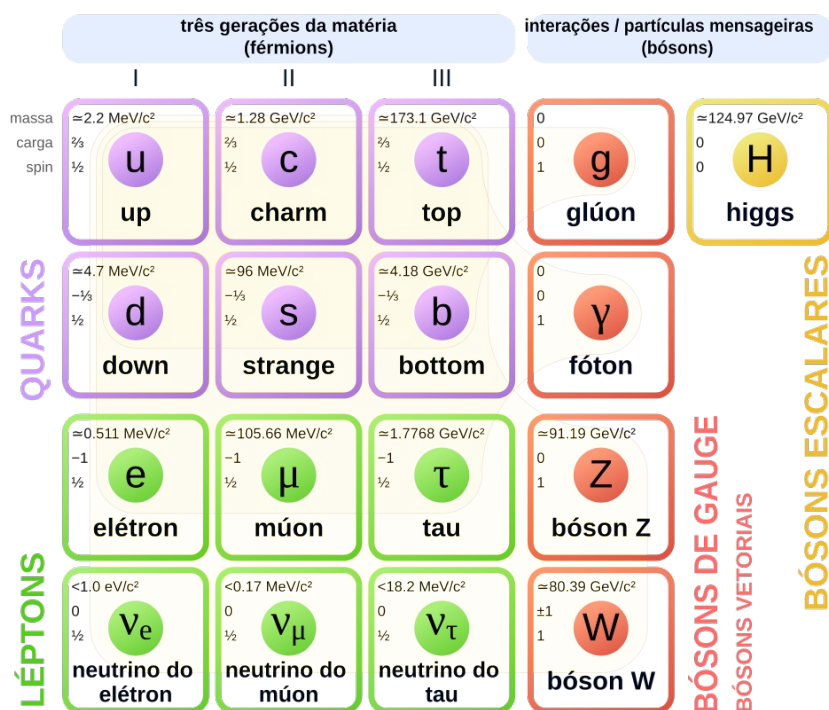


Figura 1.1: O modelo padrão das partículas elementares. Fonte: Wikipedia

A *força eletromagnética*, também chamada de força de Lorentz, atua entre partículas carregadas, como elétrons com carga negativa e prótons com carga positiva. Cargas opostas se atraem, enquanto cargas iguais se repelem. Quanto maior a carga, maior a força. E, apesar de que numa forma muito, muito pequena, essa força pode ser sentida a uma distância infinita. Ela é responsável por alguns dos fenômenos comuns que observamos: atrito, elasticidade, força normal e a força que mantém os

sólidos unidos em uma determinada forma. É até mesmo responsável pela resistência do ar que pássaros e aviões experimentam ao voar [2].

As forças eletromagnéticas são transferidas entre partículas carregadas através da troca de bósons sem massa, portadores de força, chamados fótons (Veja-o na quarta coluna e segunda linha da Fig. 1.1), que também são os componentes particulados da luz [2].

Isaac Newton foi o primeiro a propor a ideia de gravidade, descrevendo-a como uma atração literal entre dois objetos. Séculos depois, Albert Einstein sugeriu, por meio de sua teoria da relatividade geral, que a gravidade não é uma atração ou uma força. Em vez disso, é uma consequência da curvatura do espaço-tempo causada por objetos. Embora a gravidade mantenha unidos planetas, estrelas, sistemas solares e até galáxias, ela se revela a mais fraca das forças fundamentais da natureza, especialmente em escalas moleculares e atômicas [1, 2].

A *interação gravitacional* entre partículas elementares é tão pequena em comparação com as das outras três interações, que pode ser negligenciada nas energias atualmente acessíveis. Por isso, frequentemente nos referimos, na prática, às três forças da natureza. Ela pode ser mediada pelo gráviton, mas isso é ainda uma teoria, por enquanto foi observada experimentalmente apenas a onda gravitacional [2].

A *interação nuclear fraca* é responsável pelo decaimento radioativo da matéria nuclear de partículas, ou seja, a mudança literal de um tipo de partícula subatômica para outra, por meio da troca de bósons W e Z. Como a troca de sabor entre os quarks. [2].

A força fraca é crítica para as reações de fusão nuclear que alimentam o sol e produzem a energia necessária para a maioria das formas de vida aqui na Terra [2].

A *força nuclear forte* é a mais forte das quatro forças fundamentais da natureza. Ela é responsável pela ligação de partículas elementares para formar partículas maiores, como a ligação de 2 quark up e 1 quark down na formação de 1 próton. Essa força é a que mantém nêutrons e prótons juntos dentro de um átomo [2].

Assim como a força fraca, a interação nuclear forte opera apenas quando as partículas subatômicas estão extremamente próximas umas das outras. Uma vez dentro do alcance mínimo, bósons carregados sem massa chamados glúons (Veja-o na primeira linha e quarta coluna da Fig. 1.1) transmitem a força forte entre quarks e os mantêm "colados" juntos. Uma pequena fração da força forte, chamada força forte residual, atua entre prótons e nêutrons. Os prótons no núcleo se repelem por causa de sua carga semelhante, mas a força forte residual pode superar essa repulsão, de modo que as partículas permanecem ligadas no núcleo atômico [1, 2].

Uma das principais características da interação forte é o confinamento, em que o potencial é maior quanto mais distantes estiverem as partículas, e diminui sua potência conforme elas estão mais próximas. Esse fenômeno impede a observação

de quarks livres na natureza, fazendo com que estes existam apenas em estados ligados. O *Potencial de Cornell*, utilizado para descrever a espectroscopia do Charmônio, através da solução radial da equação de Schrodinger independente do tempo, escrita em coordenadas esféricas, apresenta exatamente essa mesma característica [3]. A estrutura matemática e os detalhes deste potencial serão introduzidos em detalhes mais a frente neste trabalho.

Dentre as partículas fundamentais descritas pelo Modelo Padrão, visto na Fig. 1.1, os quarks ocupam papel central na formação da matéria hadrônica (toda partícula formada por quarks), interagindo por meio da interação forte, mediada pelos glúons. Os quarks estão organizados em seis sabores: up, down, strange, charm, bottom e top e combinam-se para formar hádrons, como bárions e mésons [1, 2, 3].

Os quarks pesados despertam especial interesse no estudo da Cromodinâmica Quântica (QCD), principalmente por permitirem a investigação de regimes não perturbativos da interação forte. Nesse contexto, o quark charme destaca-se por sua massa relativamente elevada¹, possibilitando que sistemas formados por pares charme-anticharme sejam descritos, em boa aproximação, por modelos não relativísticos baseados na equação de Schrodinger [3].

Neste trabalho, investiga-se o sistema ligado composto por um quark charme e um antiquark charme, denominado charmônio ($c\bar{c}$). Este apresenta um rico espectro de estados excitados e importantes analogias com sistemas clássicos da Mecânica Quântica, como o átomo de hidrogênio [4].

Dito isso, a equação de Schrodinger desempenha papel fundamental na descrição de sistemas quânticos ligados. A partir da definição de um potencial de interação adequado, a equação permite determinar funções de onda e níveis de energia associados às partículas do sistema, fornecendo informações importantes sobre sua estrutura espectral e propriedades físicas [4].

Problemas clássicos, como o poço de potencial infinito, o oscilador harmônico quântico e o átomo de hidrogênio, constituem exemplos importantes de sistemas em que a equação de Schrodinger pode ser resolvida exatamente, servindo como base conceitual e matemática para o estudo de modelos mais complexos [4].

No caso do charmônio, entretanto, a presença de um potencial efetivo mais sofisticado torna inviável a obtenção de soluções analíticas exatas. Dessa forma, é necessário o emprego de métodos numéricos para a resolução da equação de Schrödinger, possibilitando a determinação aproximada dos níveis de energia e a análise espectroscópica do sistema [3, 4].

O *potencial de Cornell* consiste em uma parametrização efetiva da interação entre um quark e um antiquark, sendo amplamente utilizado na descrição espectroscópica de sistemas de quarks pesados [3, 5]. Sua estrutura é composta pela superposição de dois termos principais que representam propriedades fundamentais da interação forte em diferentes escalas de distância [3].

¹ O quark charme possui massa de aproximadamente 1,27GeV [9], sendo cerca de 250 vezes mais massivo que os quarks up, down e strange ($\sim 2.16\text{MeV}$ [9]). Essa elevada massa faz com que os sistemas $c\bar{c}$ apresentem velocidades relativamente menores, tornando a aproximação não relativística uma descrição bastante eficaz para o estudo de sua espectroscopia.

O primeiro deles corresponde a um *termo Coulombiano*, dominante em regimes de curta distância, associado à troca de um único glúon entre o quark e o antiquark. Nessa região, a interação apresenta comportamento semelhante ao potencial eletrostático de Coulomb, variando inversamente com a distância entre as partículas (Veja o efeito na Fig. 1.2) [3, 8].

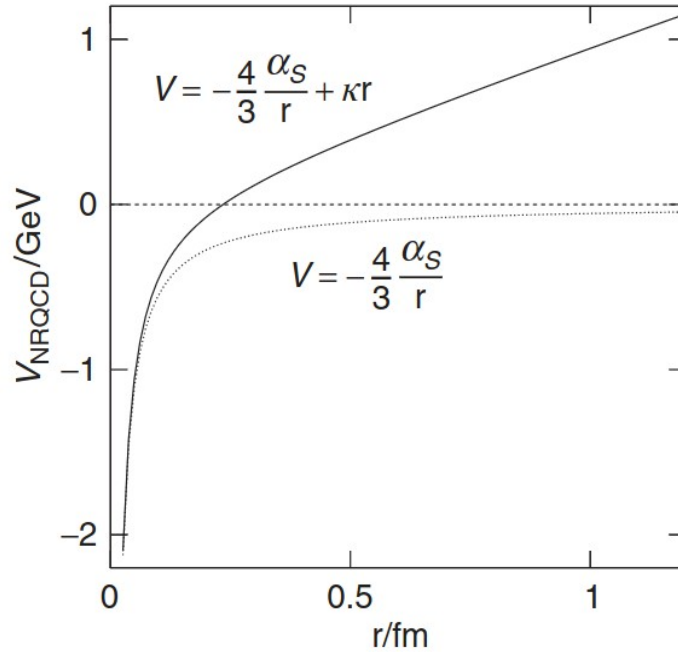


Figura 1.2: A forma aproximada do potencial QCD não relativístico para um estado $q\bar{q}$ ligado, assumindo $\alpha_s=0.2$ e $k=1\text{ GeV/fm}$. Fonte: [8]

O segundo termo é linear em relação à distância e torna-se dominante em grandes separações. Esse termo está diretamente associado ao confinamento de quarks, descrevendo o aumento aproximadamente linear da energia potencial necessária para separar o par $q\bar{q}$, como representado na Fig. 1.2 [3, 8].

A combinação entre os termos permite que o potencial de Cornell reproduza, de forma satisfatória, características importantes da QCD não perturbativa, tornando-o particularmente eficiente na descrição de estados ligados de quarks pesados, como o charmônio [3, 4, 5, 8].

O presente trabalho tem como principal objetivo investigar a formação de estados ligados e a espectroscopia do sistema de charmônio, utilizando o potencial de Cornell como modelo efetivo da interação forte. Para isso, foi realizada a resolução numérica da equação radial de Schrodinger, visando determinar os níveis de energia associados ao sistema $c\bar{c}$. A partir desses níveis, foram calculadas as massas dos estados ligados, posteriormente classificados por meio da notação espectroscópica J^{PC} . Os resultados obtidos foram então comparados com dados experimentais disponíveis na literatura especializada.

A organização desta monografia ocorre da seguinte maneira: no Capítulo 2, escreve-se o procedimento empregado na obtenção das funções de onda e níveis de energia do poço de potencial infinito unidimensional. Ainda nesse, apresenta-se o estudo do oscilador harmônico quântico unidimensional, incluindo seus níveis de energia e respectivas funções de onda construídas a partir dos polinômios de Hermite. Ademais, a solução analítica do átomo de hidrogênio é abordada, tanto a parte angular quanto a radial, conectando com o estudo do charmônio. O Capítulo 3 é dedicado à metodologia numérica empregada na resolução da equação de Schrodinger para o átomo de hidrôgenio e para o estado c $\bar{c}$. No Capítulo 4 observa-se à apresentação dos resultados obtidos para o espectro de massas do charmônio. No Capítulo 5, são discutidas as considerações finais do trabalho, bem como possíveis extensões e perspectivas futuras para o estudo desenvolvido.

Soluções da Equação de Schrodinger para Sistemas Quânticos

2

Na Mecânica Quântica, a função de onda contém todas as informações físicas acessíveis sobre o sistema estudado. A equação de Schrodinger escrita em sua forma diferencial,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V \Psi, \quad (2.1)$$

ocupa uma posição central na mecânica quântica, pois descreve a evolução temporal da função de onda $\psi(x, t)$. A partir de suas soluções, é possível obter informações sobre os estados quânticos do sistema e calcular as probabilidades associadas aos resultados de diferentes observáveis físicos [4].

Podemos justificar a forma da Eq. (2.1) examinando a solução esperada para a partícula livre, que deve dar uma onda cuja forma em qualquer instante específico, dado pela função de onda $\psi(x)$, é a de uma onda de De Broglie simples, como $\psi(x) = A \sin(kx)$, onde A é a amplitude da onda e $k = 2\pi/\lambda$ é o número de onda. Se estivermos procurando por uma equação diferencial, então precisamos tomar algumas derivadas [6]:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = k A \cos(kx), \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k^2 A \sin(kx) = -k^2 \Psi(x). \quad (2.2)$$

Através de separação de variáveis, podemos obter a equação de Schrodinger independente do tempo, ou seja, para estados estacionários [4, 6]:

$$i\hbar \frac{1}{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V. \quad (2.3)$$

Como o membro esquerdo depende exclusivamente do tempo t e o membro direito depende apenas da coordenada espacial x , a igualdade só pode ser satisfeita para todos os valores de x e t se ambos os membros forem iguais a uma mesma constante. Essa constante será identificada com a energia total do sistema e representada por E , correspondendo aos autovalores do operador Hamiltoniano [4].

A equação diferencial temporal possui solução imediata, resultando em uma dependência exponencial complexa da forma [4]:

$$\phi(t) = e^{-iEt/\hbar}. \quad (2.4)$$

Dessa forma, a evolução temporal de um estado estacionário é completamente determinada por um fator de fase dependente da energia do sistema [4].

Observa-se que a dependência temporal não altera a densidade de probabilidade do sistema, uma vez que o fator exponencial possui módulo unitário. Por essa razão, estados descritos por essa solução são denominados estados estacionários [4].

A equação diferencial associada à coordenada espacial assume a forma:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V = E \quad \text{ou} \quad \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V \psi = E \psi, \quad (2.5)$$

sendo conhecida como Equação de Schrodinger independente do tempo. Diferentemente da parte temporal, cuja solução possui forma universal, a solução dessa equação depende explicitamente do potencial $V(x)$ considerado [4].

A função $\psi(x)$ obtida a partir dessa equação contém toda a informação espacial do sistema quântico, permitindo determinar a distribuição de probabilidade da partícula por meio da quantidade $|\psi(x)|^2$. Além disso, os valores admissíveis da constante E são determinados pelas condições físicas impostas ao problema, resultando em níveis de energia discretos para sistemas ligados [4, 6].

Dessa forma, a determinação dos estados quânticos de um sistema reduz-se à resolução da equação de Schrodinger independente do tempo para um dado potencial. Toda a informação sobre as interações que atuam sobre a partícula encontra-se contida em $V(x)$, de modo que diferentes potenciais conduzem a diferentes espectros de energia e funções de onda. Nos tópicos seguintes serão analisados alguns exemplos fundamentais da Mecânica Quântica, ilustrando como a escolha do potencial influencia diretamente as propriedades físicas do sistema [4, 6].

2.1 Poço de Potencial Infinito

Uma partícula encontra-se confinada na região entre $x=0$ e $x=L$ por barreiras de energia potencial infinitamente altas. Imagine um aparato como o da Fig. 2.1, no qual a partícula se move livremente nessa região e sofre colisões elásticas com as barreiras perfeitamente rígidas que a confinam. Esse é o famoso problema da “partícula na caixa”. Assumiremos que a partícula se move em apenas uma dimensão [6].

O potencial nesse caso especial é expresso como:

$$V(x)=0, \text{ se } 0 \leq x \leq L, \text{ e } \infty, \text{ caso contrário.} \quad (2.6)$$

Fora do poço, $\Psi(x)=0$, ou seja, a probabilidade de encontrar a partícula é zero. Dentro do poço, em que $V=0$, pela Eq. (2.3), a Eq. (2.5) diz que [4, 6]:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E \psi \quad \text{ou} \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k \psi, \quad \text{onde} \quad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (2.7)$$

Essa é uma equação diferencial linear de segunda ordem, que descreve matematicamente um oscilador harmônico simples (Descrito no sub capítulo 2.2) [4] em que a solução geral é a soma das Eq. (2.2), em que A e B são constantes de normalização, aplicando a exigência de que $\psi(x)$ seja contínuo em qualquer fronteira [4, 6]:

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad 0 \leq x \leq L. \quad (2.8)$$

Neste caso, deve-se exigir que as soluções para $x < 0$ e $x > 0$ coincidam em $x = 0$; similarmente, as soluções para $L > 0$ devem coincidir em $x = L$ [4, 6]. Então:

$$\psi(L) = A \sin(kL) + B \cos(kL). \quad (2.9)$$

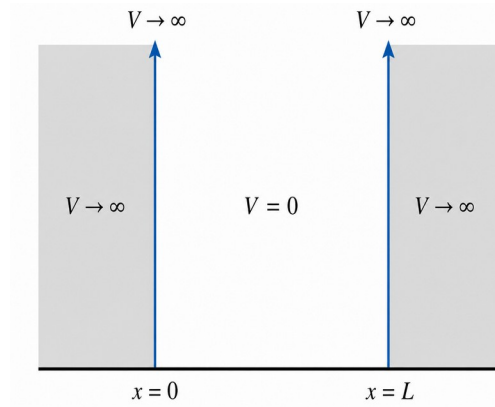


Figura 2.1: A energia potencial de uma partícula que se move livremente ($V=0$) na região $0 \leq x \leq L$, mas é completamente excluído ($V=\infty$) das regiões $x < 0$ e $x > L$. Fonte: [6]

Aplicando a condição de contorno $\psi(0)=0$, obtém-se $B=0$, de modo que a solução passa a ser dada por [6]:

$$\psi(x) = A \sin(kx). \quad (2.10)$$

Impõe-se então a segunda condição de contorno, $\psi(L)=0$, resultando em [6]:

$$A \sin(kL) = 0. \quad (2.11)$$

A escolha $A=0$ conduz à solução trivial $\psi(x)=0$, que não possui significado físico. Portanto, deve-se exigir que $\sin(kL)=0$, o que implica [6]:

$$kL = n\pi, \text{ onde } n=1, 2, 3, \dots \quad (2.12)$$

Com $k=2\pi/\lambda$, temos $\lambda=2L/n$; Assim, a solução da equação de Schrodinger para uma partícula presa em uma região linear de comprimento L é uma série de ondas estacionárias de De Broglie [4].

Resolvendo a Eq. (2.12) para k e substituindo na Eq. (2.7), obtém-se [6]:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}. \quad (2.13)$$

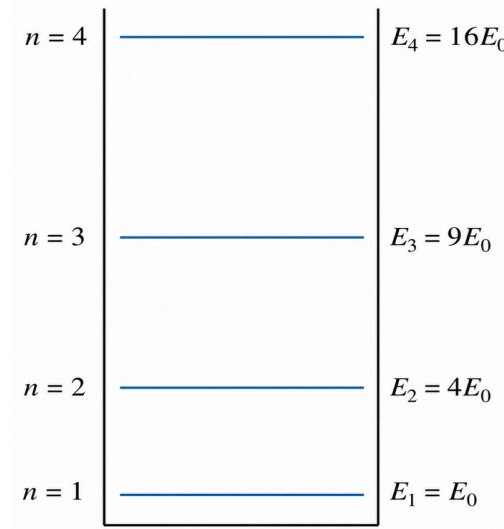


Figura 2.2: Os quatro primeiros níveis de energia do poço quadrado infinito unidimensional. Fonte: [6]

O estado de energia mais baixo, para o qual $n=1$ (Veja-o na Fig. 2.2), é conhecido como estado fundamental, e os com energias mais altas ($n>1$) são conhecidos como estados excitados [4, 6]. Como a energia é puramente cinética neste caso, o resultado significa que apenas certos valores de momento. A partir de um estado de energia, a partícula pode fazer saltos ou transições para outro estado de energia absorvendo ou liberando uma quantidade de energia igual à diferença de energia entre os dois estados [3, 4, 6].

A equação de Schrodinger independente do tempo produziu um conjunto infinito de soluções (uma para cada número inteiro positivo n) [4, 6]. As primeiras soluções estão representadas na Fig. 2.3 em uma comparação direta da função de onda e as respectivas densidades de probabilidade cujas energias aumentam proporcionalmente a n^2 . Como conjunto, as funções $\psi_n(x)$ têm algumas propriedades interessantes e importantes [4]:

1. São alternadamente par e ímpar em relação ao centro do poço: ψ_1 é par, ψ_2 é ímpar, ψ_3 é par, e assim por diante [4];
2. Conforme há ganho de energia, cada estado sucessivo ganha mais um nó (cruzamento zero): ψ_1 não tem nenhum (os extremos não contam), ψ_2 tem um, ψ_3 tem dois, e assim por diante [4].

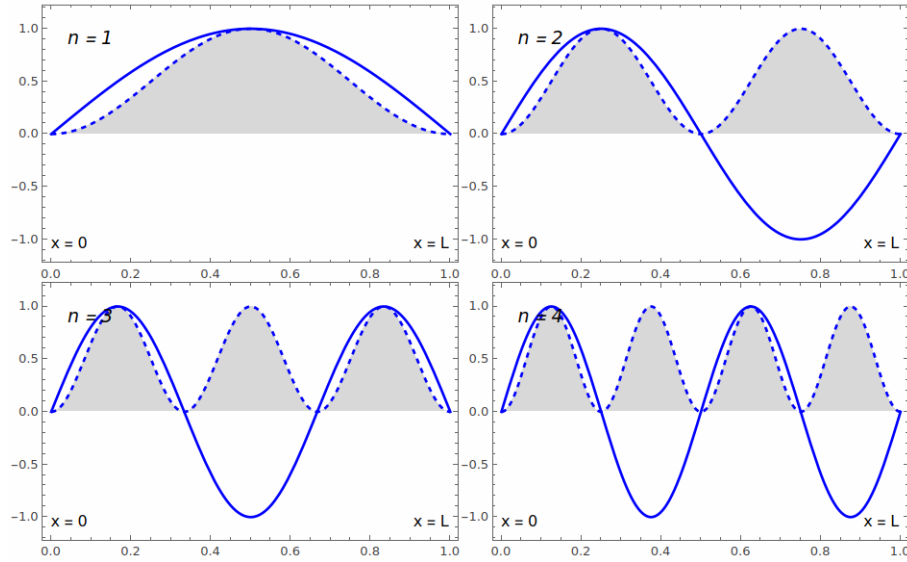


Figura 2.3: As funções de onda, $\psi_n(x)$ (linha contínua), e as respectivas densidades de probabilidade, $|\psi_n(x)|^2$ (linha tracejada), para o poço de potencial infinito unidimensional, para os estados com $n = 1, 2, 3$ e 4 . Produção dos gráficos: Plataforma Wolfram.

2.2 Oscilador Harmônico Quântico

Após o estudo do poço de potencial infinito, que constitui um dos exemplos mais elementares de quantização em Mecânica Quântica, torna-se natural avançar para sistemas descritos por potenciais mais realistas e fisicamente relevantes. Nesse contexto, o oscilador harmônico quântico representa um passo importante no desenvolvimento teórico de sistemas quânticos ligados, introduzindo um potencial contínuo capaz de descrever pequenas oscilações em torno de posições de equilíbrio [4, 6].

Além de possuir solução analítica exata, o oscilador harmônico desempenha papel central em diversas áreas da Física, aparecendo como aproximação para inúmeros sistemas físicos. Seu estudo permite compreender aspectos fundamentais da quantização da energia, da estrutura das funções de onda e do comportamento de partículas submetidas a potenciais confinantes suaves, servindo como uma etapa intermediária entre modelos idealizados simples e sistemas mais complexos, como o átomo de hidrogênio e os estados ligados de quarks pesados [4, 6].

O oscilador clássico é um objeto de massa m preso a uma mola de constante elástica k . A mola exerce uma força restauradora $F = -kx$ sobre o objeto, onde x é o deslocamento a partir de sua posição de equilíbrio. Usando as leis de Newton, podemos analisar o oscilador e mostrar que ele tem uma frequência (circular ou

angular) $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$ e um período $T = 2\pi\sqrt{\frac{m}{k}}$. A distância máxima do objeto oscilante de sua posição de equilíbrio é $+x_0$. O oscilador tem sua energia cinética máxima em $x=0$ e ela desaparece nos pontos de inflexão $x = \pm x_0$. Nos pontos de inflexão, o oscilador para por um instante e então inverte sua direção de movimento, que é confinado à região $-x_0 \leq x \leq +x_0$. Veja essa estrutura na Fig. 2.4 [4, 6, 7].

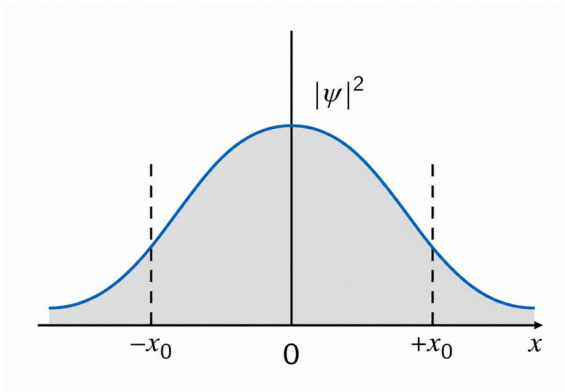


Figura 2.4: Densidade de probabilidade para o estado fundamental do oscilador harmônico simples. Fonte: [6]

Embora nunca se tenha encontrado um exemplo de oscilador quântico unidimensional na natureza, qualquer sistema em um poço de energia potencial que varia suavemente próximo ao seu mínimo se comporta aproximadamente como um. Uma molécula formada por um sistema ligado de 2 átomos vibrante, por exemplo. Por isso é interessante analisar o movimento de tal sistema usando mecânica quântica [6].

Uma força $F = -kx$ tem a energia potencial associada [4, 7]

$$V = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, \quad \text{onde} \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad (2.14)$$

e assim pode-se reescrever a equação de Schrodinger [4, 7]:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi = E \psi, \quad (2.15)$$

onde V e ψ são funções apenas de x , pois essa abordagem está sendo feita em uma dimensão. Afinal, não há limites entre diferentes regiões de energia potencial aqui, então a função de onda deve cair para zero tanto para $x \rightarrow +\infty$ quanto para $x \rightarrow -\infty$ [6].

Com o intuito de facilitar as contas no método de séries utilizado para resolver a Eq. (2.15), vale a introdução de uma variável adimensional [4]:

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x; \quad (2.16)$$

Em termos de ξ a Eq. (2.14) fica [4]:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} = (\xi^2 - K) \psi \quad \text{em que} \quad K \equiv \frac{2E}{\hbar \omega}. \quad (2.17)$$

Após resolver a Eq. (2.14), é possível mostrar que a função de onda normalizada para o oscilador assume a forma [4, 6, 7]:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad \text{onde } n=0,1,2,3,\dots, \quad (2.18)$$

em que $H_n(\xi)$ são os Polinômios de Hermite [4, 6, 7].

E as energias correspondentes para cada estado n são [4, 6, 7]:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad \text{para } n=0,1,2,3,\dots \quad (2.19)$$

Os níveis de energia são mostrados na Fig. 2.5. Eles são uniformemente espaçados, em contraste com o poço de potencial infinito unidimensional visto no tópico anterior [4, 6].

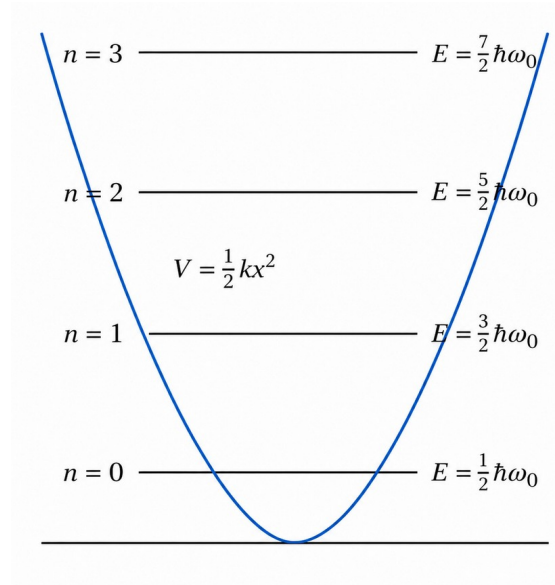


Figura 2.5: Níveis de energia de um oscilador harmônico simples. Fonte: [6]

O módulo da função de onda está representado na Fig. 2.6. Todas as soluções têm a propriedade de ultrapassar a região proibida além dos pontos de retorno clássicos, diminuindo a probabilidade de encontrar a partícula exponencialmente [6]. A densidade de probabilidade oscila, de certa forma, como uma onda senoidal entre os pontos de retorno e diminui como e^{-ax^2} até zero além dos pontos de retorno [4, 6]. Observe a grande semelhança entre as densidades de probabilidade para o oscilador quântico e as do poço de potencial finito (Fig. 2.3).

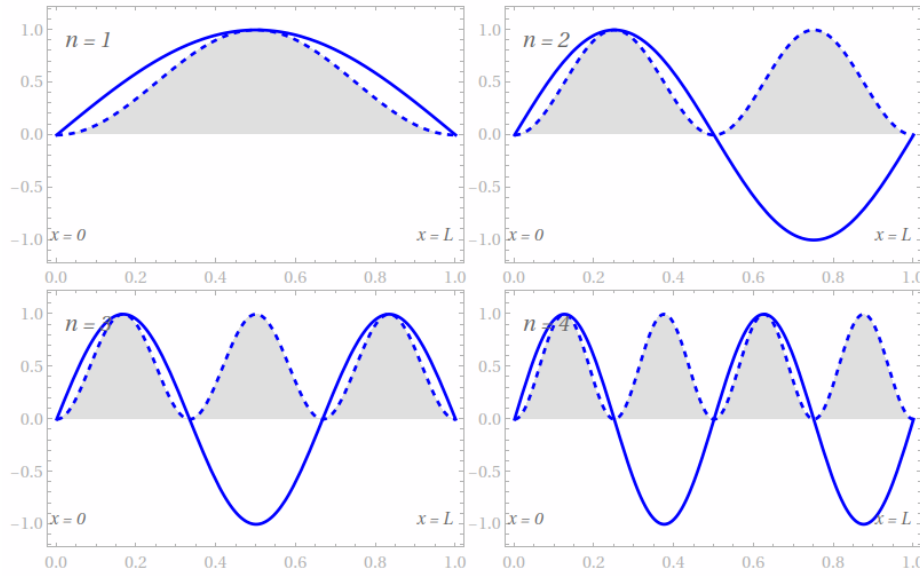


Figura 2.6: Funções de onda $\psi(x)$ (linha contínua) e suas densidades de probabilidade $|\psi(x)|^2$ (linha pontilhada) para os quatro primeiros estados estacionários ($n=1, 2, 3, 4$) do oscilador harmônico simples. Observa-se o aumento do número de nós da função de onda com o número quântico n . Produção dos gráficos: Plataforma Wolfram.

Uma sequência de estados vibracionais excitados semelhante à Fig. 2.5 é comumente encontrada em moléculas diatômicas. O espaçamento entre os estados é tipicamente de 0,1 a 1 eV; os estados são observados quando fótons (na região infravermelha do espectro) são emitidos ou absorvidos à medida que a molécula salta de um estado para outro. Uma sequência semelhante é observada em núcleos, onde o espaçamento é de 0,1 a 1 MeV e as radiações estão na região de raios gama do espectro [6].

2.3 Solução Analítica do átomo de Hidrogênio

O átomo de hidrogênio, composto por um próton e um elétron, ocupa posição central no desenvolvimento da Mecânica Quântica, constituindo o primeiro sistema físico real cuja equação de Schrodinger admite solução analítica completa. A obtenção dessa solução é possível porque se trata de um sistema de dois corpos interagindo por uma força central. Assim, é possível reduzi-lo a um problema de uma única

partícula descrita por uma massa reduzida ($\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$). Como a massa do próton é

aproximadamente 1836 vezes maior que a do elétron, a massa reduzida do sistema é praticamente igual à massa do elétron. Dessa forma, o problema pode ser tratado, com excelente aproximação, como o movimento de um elétron sob a influência de uma força central descrita pelo potencial de Coulomb gerado pelo próton [6]. Seu estudo fornece uma descrição exata de estados ligados submetidos a um potencial

central Coulombiano, permitindo a introdução de conceitos fundamentais como números quânticos, momento angular orbital e degenerescência dos níveis de energia [4, 6].

Além de sua relevância histórica, a solução do átomo de hidrogênio estabelece a base matemática utilizada na descrição de sistemas ligados mais complexos. Muitos dos métodos desenvolvidos para esse sistema, como a separação de variáveis em coordenadas esféricas e a análise da equação radial, permanecem cruciais em aplicações modernas da Mecânica Quântica. Nesse contexto, um exemplo dessa aplicação é o estudo espectroscópico de estados ligados de quarks pesados, como o charmônio, que será explorado em seções futuras neste trabalho [6].

2.3.1 A Equação de Schrodinger em coordenadas esféricas

A descrição quântica do átomo de hidrogênio é realizada por meio da equação de Schrodinger aplicada a um sistema composto por um elétron submetido ao potencial eletrostático gerado pelo próton. Devido à simetria esférica desse potencial, torna-se conveniente expressar a equação de Schrodinger em coordenadas esféricas, permitindo explorar as propriedades geométricas do sistema de forma mais adequada [4].

O potencial associado à interação entre o elétron e o próton é dado pelo potencial Coulombiano:

$$V(r) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (2.20)$$

o qual depende exclusivamente da coordenada radial (r) [4, 6, 7]. Essa dependência apenas da distância entre as partículas caracteriza o sistema como um problema de potencial central, tornando possível a separação das variáveis radial e angular da função de onda [4, 6].

Nesse contexto, como o potencial coulombiano depende apenas da distância entre o elétron e o núcleo, isto é, da coordenada radial (r), torna-se conveniente substituir as coordenadas cartesianas (x, y, z) por coordenadas esféricas (r, θ, ϕ), relacionadas por [4]:

$$x = r \sin(\theta) \cos(\phi); \quad y = r \sin(\theta) \sin(\phi); \quad z = r \cos(\theta). \quad (2.21)$$

Essa escolha explora a simetria esférica do problema e simplifica significativamente a resolução da equação. Reescrevendo o operador laplaciano em coordenadas esféricas, a equação de Schrodinger independente do tempo assume a forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right) \right] + V \psi = E \psi. \quad (2.22)$$

A simetria esférica do potencial permite buscar soluções para o sistema utilizando o método de separação de variáveis. Assim, a função de onda pode ser escrita como:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi), \quad (2.23)$$

onde $R(r)$ descreve a dependência radial da função de onda e $Y(\theta, \phi)$ é a parte angular (harmônicos esféricos) [4]. A partir dessa decomposição, a equação de Schrodinger pode ser separada em duas equações diferenciais independentes. Impondo condições de contorno físicas às soluções dessas equações, surge a quantização das constantes de separação. Dessa forma, revelam-se os números quânticos e os níveis de energia do átomo de hidrogênio [4, 6].

Inserindo a Eq. (2.23) na Eq. (2.22), obtém-se [4]:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left[\frac{Y}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{R}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{R}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] + VRY = ERY. \quad (2.24)$$

Realizando as devidas manipulações na equação, chega-se em 2 termos, um apenas com as variáveis angulares (θ e ϕ) e outro dependendo apenas de r . Essas variáveis variam de forma independente, então a única forma de satisfazer a igualdade em todo o espaço é se os termos forem uma mesma constante de separação. Por conveniência, a constante é definida por $l(l+1)$, resultando em [4, 6]:

$$\frac{1}{R} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] = l(l+1) \text{ ou} \quad (2.25)$$

$$\frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right\} = -l(l+1). \quad (2.26)$$

2.3.2 Solução Angular e os Harmônicos Esféricos

A separação da função de onda em coordenadas esféricas conduz naturalmente a uma equação angular associada às variáveis θ e ϕ [4, 6]. Essa etapa é fundamental na solução do átomo de hidrogênio, pois permite descrever as propriedades relacionadas ao momento angular orbital do elétron e às simetrias espaciais do sistema.

Assumindo a decomposição da função de onda na forma da Eq. (2.23) o método de separação de variáveis pode ser aplicado na parte angular, permitindo escrevê-la como produto de duas funções independentes [4, 6, 7]:

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi). \quad (2.27)$$

A substituição dessa forma na Eq. (2.26) resulta em duas equações diferenciais independentes: uma dependente da coordenada azimutal (ϕ) e outra associada ao ângulo polar (θ). A solução da equação em ϕ deve satisfazer a condição de periodicidade da função de onda, isto é, o valor da função deve permanecer inalterado após uma rotação completa de 2π . Essa exigência leva naturalmente ao aparecimento do número quântico magnético (m), que assume apenas valores

inteiros. Já a equação em θ possui como soluções os polinômios associados de Legendre, cuja existência impõe restrições adicionais que introduzem o número quântico orbital (l) [4, 6].

As funções de onda angulares normalizadas são conhecidas como *harmônicos esféricos*:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \epsilon \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos\theta), \quad (2.28)$$

onde ϵ representa o fator de fase (fase de Condon–Shortley), introduzido para garantir as propriedades de simetria e ortogonalidade dos harmônicos esféricos [4]. Essas funções descrevem a amplitude de probabilidade angular do elétron em torno do núcleo e apresentam importantes propriedades de ortogonalidade e simetria.

Os números quânticos l e m estão diretamente relacionados à quantização do momento angular orbital. O número quântico l é inteiro e não negativo e determina o módulo do momento angular orbital do sistema, enquanto m descreve sua projeção ao longo de um eixo escolhido, convencionalmente o eixo z . Vale ressaltar que m é restrito ao intervalo $-l \leq m \leq +l$ [6].

Além de sua importância matemática, os harmônicos esféricos possuem interpretação física significativa, estando associados às diferentes formas geométricas dos orbitais atômicos. As simetrias apresentadas por essas soluções desempenham papel fundamental em espectroscopia quântica e reaparecem em diversos sistemas ligados descritos por potenciais centrais, incluindo sistemas de quarks pesados estudados em Física de Partículas [6].

A partir das autofunções calculadas analiticamente, foram construídas representações gráficas dos harmônicos esféricos associados às soluções angulares. Essas visualizações permitem analisar de maneira mais intuitiva as propriedades geométricas e probabilísticas dos diferentes estados quânticos.

A Fig. 2.7 apresenta um exemplo da estrutura angular associada aos harmônicos esféricos obtidos analiticamente. Observa-se que diferentes combinações dos números quânticos produzem padrões de simetria distintos, refletindo diretamente as propriedades do momento angular orbital do sistema.

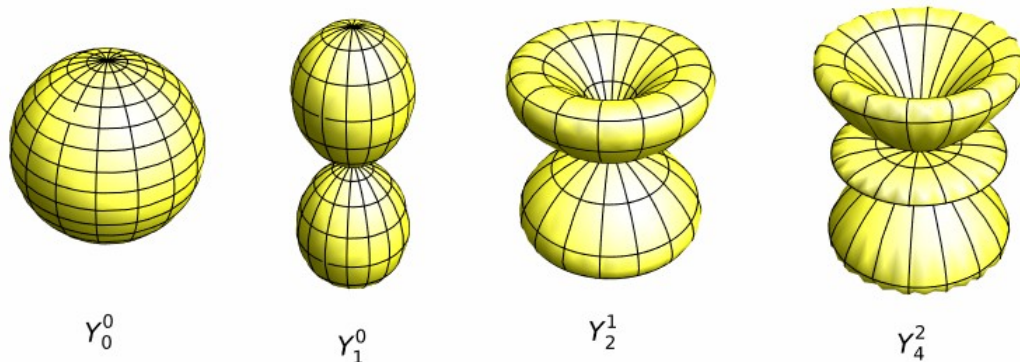


Figura 2.7: Representação tridimensional de alguns harmônicos esféricos, evidenciando sua estrutura angular e propriedades de simetria. Produção: Plataforma Wolfram.

Além disso, as densidades de probabilidade obtidas evidenciam regiões espaciais preferenciais para a localização do elétron, reproduzindo comportamentos característicos previstos pela solução analítica do átomo de hidrogênio.

2.3.3 Solução Radial

Após a separação das variáveis angulares, a equação de Schrodinger reduz-se a uma equação diferencial radial responsável por descrever a dependência da função de onda em relação à distância entre o elétron e o núcleo. A solução dessa equação fornece informações fundamentais sobre os níveis de energia permitidos e sobre a distribuição espacial de probabilidade da partícula [6].

A equação radial do átomo de hidrogênio pode ser escrita como:

$$\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] R = l(l+1) R, \quad (2.29)$$

onde $R(r)$ representa a parte radial da função de onda e (l) corresponde ao número quântico orbital associado ao momento angular [4, 6].

A presença do termo proporcional a $l(l+1)$ permite interpretar a equação radial em termos de um potencial efetivo, dado pela soma entre o potencial Coulombiano e um termo centrífugo associado ao momento angular orbital da partícula [6]. Dessa forma, a dinâmica radial do sistema passa a ser governada por um potencial efetivo da forma [4, 6]:

$$V(r) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (2.30)$$

A análise assintótica da equação radial mostra que as soluções fisicamente aceitáveis devem permanecer finitas tanto na origem quanto no limite [4, 6]. Essas condições conduzem naturalmente a soluções expressas em termos dos polinômios

associados de Laguerre, introduzindo o número quântico principal (n), responsável pela quantização dos níveis de energia do átomo de hidrogênio [4].

Como consequência, obtém-se o conhecido espectro de energia:

$$E_n = -\left[\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\right] \frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2}, \quad \text{onde } n=1, 2, 3, \dots, \quad (2.31)$$

o qual evidencia que os estados ligados do átomo de hidrogênio possuem energias discretas e negativas [4, 6, 7]. O sinal negativo indica que o elétron encontra-se ligado ao núcleo, sendo necessária uma quantidade mínima de energia para ionizar o sistema [6].

Os níveis de energia do átomo de hidrogênio dependem apenas do número quântico principal (n), resultando em uma degenerescência associada aos diferentes valores possíveis dos números quânticos l e m [4, 6]. Essa estrutura degenerada reflete a

elevada simetria do potencial Coulombiano e constitui uma das características mais importantes da solução analítica do átomo de hidrogênio [6].

Solução Numérica pelo Método dos Elementos Finitos

3

Embora o átomo de hidrogênio admita solução analítica exata, a resolução numérica da equação de Schrodinger constitui uma etapa importante na validação de métodos computacionais aplicados a sistemas quânticos ligados. Além de reproduzir os níveis de energia conhecidos experimentalmente, o tratamento numérico permite visualizar funções de onda e densidades de probabilidade associadas aos diferentes estados quânticos.

Nesse contexto, o estudo numérico do átomo de hidrogênio desempenha papel intermediário entre os modelos analíticos fundamentais da Mecânica Quântica e sistemas mais complexos, como o harmônio, cuja solução analítica não pode ser obtida de forma exata.

A resolução numérica da equação de Schrodinger para o átomo de hidrogênio foi realizada utilizando o software Wolfram, por meio da função *NDEigensystem*, empregada na obtenção numérica de autofunções e autovalores associados a equações diferenciais. O método utilizado baseia-se na discretização da equação diferencial em uma malha finita, permitindo transformar o problema contínuo em um sistema algébrico solucionável computacionalmente.

3.1 Solução Numérica do Átomo de Hidrogênio

Neste trabalho, foi considerada a equação radial de Schrodinger associada ao potencial Coulombiano, como descrito pelo potencial efetivo na Eq. (2.30), incluindo também o termo centrífugo dependente do número quântico orbital (l). O domínio radial foi definido em um intervalo suficientemente grande para garantir o decaimento adequado das funções de onda e minimizar efeitos numéricos associados às condições de contorno.

As soluções foram obtidas para diferentes valores dos números quânticos n , l e m , permitindo investigar tanto os níveis de energia quanto as propriedades espaciais das funções de onda associadas aos estados ligados do átomo de hidrogênio. As unidades adotadas foram escolhidas de forma a simplificar a implementação computacional e facilitar a comparação com os resultados analíticos conhecidos.

Com o objetivo de validar a metodologia numérica empregada neste trabalho, a equação radial de Schrodinger para o átomo de hidrogênio foi resolvida utilizando o método dos elementos finitos. A partir da implementação numérica, foram obtidas as

funções de onda radiais correspondentes aos diferentes estados quânticos do átomo de hidrogênio, bem como seus respectivos autovalores de energia. Inicialmente, os resultados foram fornecidos em unidades atômicas de energia (*Hartree*²), convenientes para cálculos computacionais em Mecânica Quântica. Posteriormente, esses valores foram convertidos para elétron-volts (eV), permitindo uma comparação direta com os valores tradicionalmente apresentados na literatura.

Para a resolução numérica da equação radial, foi utilizada a função radial reduzida $u(r)$, definida como:

$$u(r) = rR(r), \quad (3.1)$$

onde $R(r)$ representa a função radial usual do átomo de hidrogênio. Essa transformação permite reescrever a equação de Schrodinger radial em uma forma unidimensional mais adequada para a aplicação do método dos elementos finitos, eliminando o termo de primeira derivada presente na equação original.

A Fig. 3.1 apresenta as funções radiais reduzidas obtidas numericamente para os quatro primeiros níveis de energia do átomo de hidrogênio. Observa-se que o número de nós aumenta com o número quântico principal (n), enquanto a extensão espacial das soluções cresce para estados de maior energia. Essas características estão em concordância com os resultados previstos pela solução analítica do problema e refletem diretamente a estrutura quantizada dos estados ligados do sistema.

Os níveis de energia calculados reproduzem a conhecida estrutura discreta do espectro do hidrogênio, evidenciando a quantização das energias permitidas para o elétron ligado ao núcleo. A concordância entre os resultados numéricos e os valores teóricos esperados demonstra a confiabilidade do método empregado, fornecendo uma importante etapa de validação antes de sua aplicação ao estudo de sistemas mais complexos, como o charmônio.

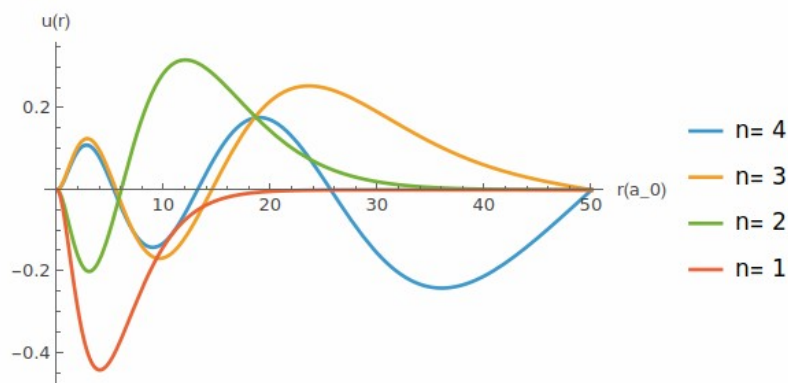


Figura 3.1: Funções radiais reduzidas $u(r)$ dos estados ligados do átomo de hidrogênio para os níveis principais $n=1, 2, 3$ e 4 , em função da distância radial r (em unidades do raio de Bohr a_0). Produção:

Plataforma Wolfram

² Hartree (Ha) é uma unidade de energia amplamente utilizada em Física Atômica e Química. Ela corresponde à energia potencial eletrostática entre um elétron e um próton separados por um raio de Bohr. Numericamente, $1 \text{ Ha} \sim 27,2114 \text{ eV}$.

Observa-se que os estados de menor energia apresentam maior concentração de probabilidade nas proximidades do núcleo, enquanto estados excitados exibem distribuição espacial mais extensa. Além disso, o surgimento de nodos radiais para valores crescentes de (n) reflete diretamente a estrutura matemática das soluções da equação radial de Schrodinger e constitui uma das principais características dos estados ligados do átomo de hidrogênio.

4

Charmônio: um estado ligado $c\bar{c}$

Após a validação da metodologia numérica por meio da resolução do átomo de hidrogênio, um sistema cuja solução analítica é amplamente conhecida, o mesmo procedimento pode ser estendido para o estudo de sistemas mais complexos. Entre eles, destacam-se os estados ligados formados por quarks pesados, cuja descrição exige a consideração das propriedades da interação forte [2, 3, 5].

Neste contexto, o sistema charmônio, composto por um quark charme e um antiquark charme ($c\bar{c}$), constitui um dos exemplos mais importantes da física hadrônica moderna. Devido à elevada massa do quark charme ($1.2730 \pm 0.004 \text{ GeV}$, de acordo com dados do PDG [9]), os efeitos relativísticos tornam-se menos pronunciados do que em sistemas formados por quarks leves, permitindo que uma abordagem não relativística baseada na equação de Schrodinger forneça uma descrição bastante satisfatória de seu espectro de estados ligados [8, 10].

Dessa forma, o estudo do charmônio representa uma oportunidade de aplicar os métodos desenvolvidos ao longo deste trabalho em um sistema de relevância experimental e teórica, estabelecendo uma conexão direta entre a Mecânica Quântica não relativística e a Cromodinâmica Quântica.

A confirmação experimental da existência do quark charme ocorreu em 1974, durante um período conhecido como Revolução de Novembro. Nesse ano, grupos independentes liderados por Burton Richter, no SLAC, e Samuel Ting, no Brookhaven National Laboratory, observaram uma nova ressonância hadrônica com massa próxima de 3.1 GeV . A partícula recebeu o nome de $\psi(3105)$ pelos dois grupos de pesquisa e, posteriormente, passou a ser conhecida como J/ψ . Atualmente, esse estado é interpretado como o estado fundamental vetorial do sistema charmônio. [11, 12, 13]

A interação forte apresenta um comportamento característico decorrente da dinâmica das cargas de cor descrita pela Cromodinâmica Quântica. Em pequenas distâncias, a interação entre quarks é associada a interação eletromagnética (troca de fótons) por conta das cargas opostas do charmônio (assim como o elétron e o próton no átomo de hidrogênio). Na parte superior da Fig. 4.1 encontra-se a representação da força³ em função da energia do sistema. Nessa região, os quarks encontram-se fortemente ligados, mas a intensidade efetiva da interação torna-se suficientemente reduzida para que possam ser tratados como quase livres [3, 5, 8, 11].

Por outro lado, quando a distância entre os quarks aumenta, a interação forte passa a manifestar o fenômeno do confinamento de cor, no qual a energia potencial cresce aproximadamente de forma linear com a separação [5, 8].

³ A força é a derivada do potencial, assim, em pequenas distâncias a intensidade diminui continuamente. Se o potencial cresce linearmente com r , como é o caso do confinamento, a força é constante.

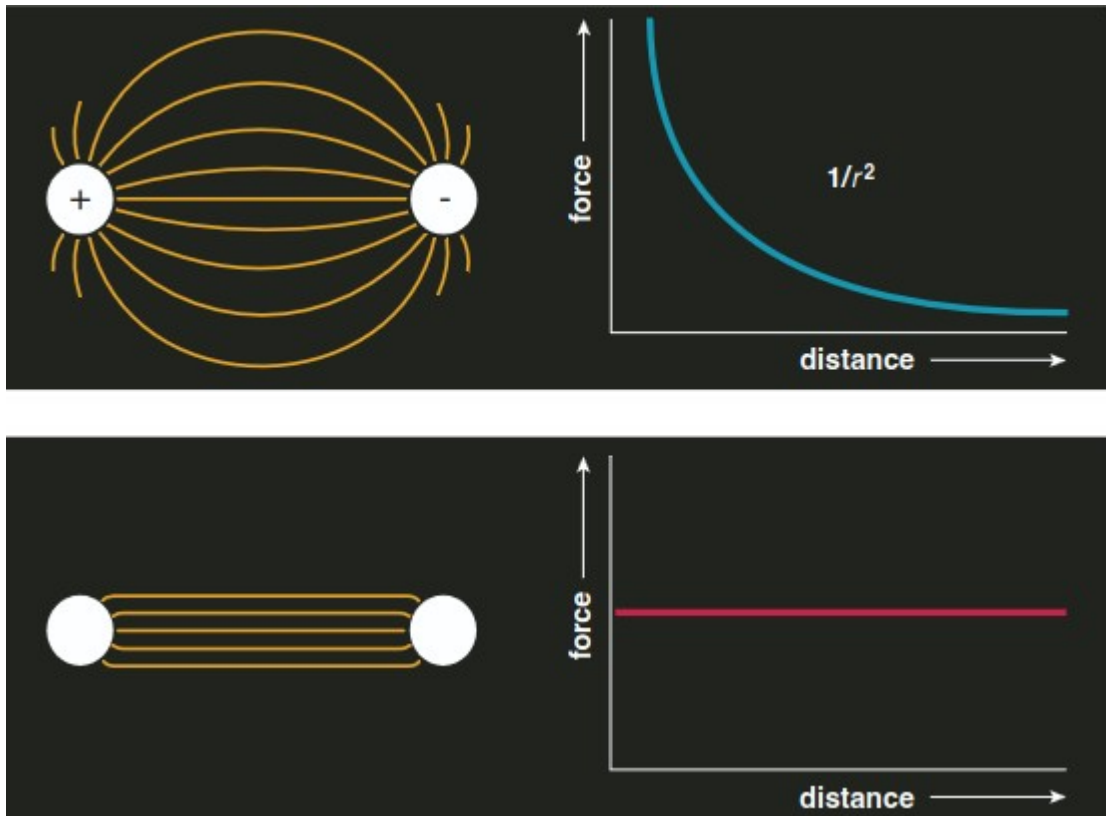


Figura 4.1: As linhas do campo elétrico que conectam duas partículas com cargas opostas tendem a se espalhar para fora, dando origem a uma propriedade característica tanto da força eletrostática (Coulomb) quanto da gravidade: a magnitude da força diminui com o quadrado da distância de uma carga ou massa (acima). As linhas do campo cromomagnético quântico que conectam dois quarks, no entanto, permanecem em um feixe compacto, o que fornece uma força constante (abaixo). Fonte: [14]

4.1 Potencial de Cornell

Entre os diversos modelos propostos na literatura, o potencial de Cornell (Equação 3.2) destaca-se por sua simplicidade e notável capacidade de reproduzir o espectro de massas de sistemas formados por quarks pesados. Desenvolvido originalmente para o estudo do charmônio, esse potencial incorpora de maneira efetiva tanto o regime de pequenas distâncias quanto o confinamento [3, 4, 5, 11, 14].

Matematicamente, o potencial de Cornell é escrito como:

$$V(r) = -\frac{4}{3} \frac{a}{r} + br, \quad (4.1)$$

onde r representa a distância entre o quark e o antiquark, a é uma constante associada à intensidade da interação de curto alcance e b corresponde à chamada tensão da corda, responsável pelo confinamento [4, 5, 11].

O primeiro termo possui a mesma dependência radial do potencial de Coulomb e descreve a interação dominante quando os constituintes encontram-se muito próximos [8, 14].

Por outro lado, o segundo termo cresce linearmente com a distância e representa o fenômeno de confinamento previsto pela Cromodinâmica Quântica. À medida que o quark e o antiquark são afastados, a energia potencial armazenada entre eles aumenta continuamente, tornando energeticamente desfavorável sua separação completa. Como consequência, os quarks permanecem permanentemente confinados em estados ligados, como representado na Fig. 4.2 [8, 14].

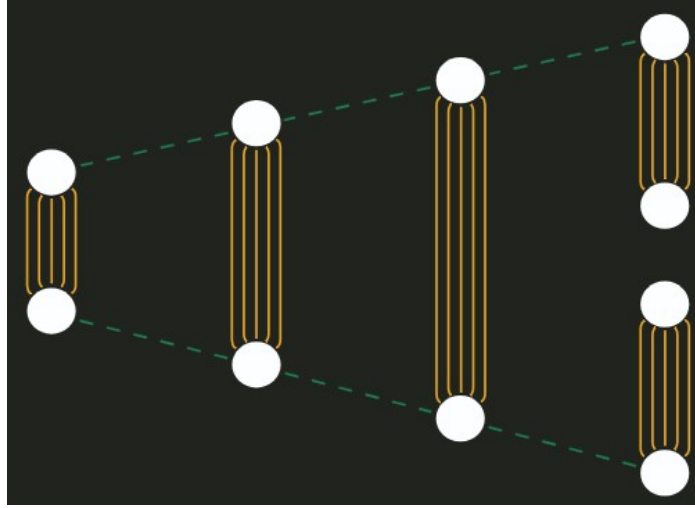


Figura 4.2: As tentativas de isolar os dois quarks que compõem um méson típico invariavelmente falham, porque a energia injetada no sistema é transformada em um novo quark e antiquark, que se ligam às extremidades cortadas das linhas de fluxo estendidas. Fonte: [14]

Embora o potencial de Cornell seja capaz de reproduzir satisfatoriamente a estrutura global do espectro de quarkônios pesados, sua forma básica não contempla determinados efeitos associados ao spin dos constituintes. Em particular, estados que possuem os mesmos números quânticos orbitais podem apresentar pequenas diferenças de massa decorrentes da interação entre os spins do quark e do antiquark [10].

Para incorporar esse efeito, frequentemente denominado interação hiperfina, adiciona-se ao potencial efetivo um termo dependente dos spins dos constituintes, representado por $V_{ss}(r)$:

$$V_{ss} = \frac{16\pi a}{9m_c^2} \delta_\sigma(r) \left[S(S+1) - \frac{3}{2} \right], \quad (4.2)$$

onde S é o spin do charmônio, m_c é a massa do charme e $\delta_\sigma(r) = \left(\frac{\sigma}{\sqrt{\pi}}\right)^3 e^{-\sigma^2 r^2}$ [10].

Esse termo é responsável pelo desdobramento espectral observado entre estados singletos e tripletos do sistema $c\bar{c}$ [14].

Dessa forma, o potencial efetivamente utilizado neste trabalho não corresponde apenas ao potencial de Cornell, mas à soma deste com a contribuição hiperfina. O potencial total pode ser escrito como [10]:

$$V_T = V_{\text{Cornell}} + V_{ss}. \quad (4.3)$$

4.2 Solução Numérica do Charmônio

Neste trabalho, o potencial de Cornell somado a interação spin-spin, representado na Eq. (4.3), foi utilizado como potencial efetivo dentro da equação radial de Schrodinger. A partir de sua resolução numérica, foram determinados os níveis de energia do sistema $c\bar{c}$, possibilitando a construção do espectro de massas do charmônio e sua posterior comparação com os resultados experimentais disponíveis na literatura.

Recaptulando a Eq. (2.29) da seção 2.3.3, temos a equação radial unidimensional que, apesar de especificada para o átomo de hidrogênio, também pode ser usada para solução do charmônio, uma vez que a única variável é o potencial, que pode ser substituído:

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V_T(r) - E] R = l(l+1)R, \quad (4.4)$$

onde $V_T(r)$ corresponde ao potencial total e l é o número quântico orbital, busca-se determinar os autovalores de energia (E) e suas respectivas autofunções ($u(r)$).

Para garantir soluções fisicamente aceitáveis, foram impostas condições de contorno adequadas. Como a função radial reduzida deve permanecer finita na origem e tender a zero para grandes distâncias, adotou-se $r_{\min}=0$ e $r_{\max}=20$ onde $r_{\max}$ corresponde ao limite superior do domínio numérico. Considerando a variável radial na forma adimensional, esse valor foi entendido na escala do problema, isto é, como um número suficientemente grande para que os valores já tenham decaído de forma desprezível.

Os parâmetros do potencial de Cornell utilizados neste trabalho foram retirados do artigo referenciado em [10] e postos na Tabela 4.1 de forma a reproduzir adequadamente o espectro conhecido do sistema charmônio. Além disso, foi adotado para o quark charme um valor efetivo de massa igual a 1.409 MeV , valor escolhido baseado tanto nos dados do PDG [9], quanto do artigo [10]. Esses parâmetros definem completamente o Hamiltoniano do sistema e permitem a obtenção dos níveis de energia associados aos diferentes estados quânticos.

Parâmetros	Valores	Unidades
a	0.350	—
b	0.15	GeV^2
σ	4.0	GeV

Tabela 4.1: Parâmetros usados neste trabalho. Fonte: [10]

A resolução foi realizada para diversos valores dos números quânticos radial (n) e orbital (l), permitindo investigar estados pertencentes às famílias $S(l=0)$, $P(l=1)$, $D(l=2)$ e $F(l=3)$. Para cada solução encontrada, o autovalor obtido corresponde à energia de ligação do sistema, enquanto a autofunção associada descreve a distribuição espacial relativa entre o quark e o antiquark.

Uma vez determinados os autovalores da equação radial, as massas dos estados ligados foram calculadas a partir da relação:

$$M = 2m_c + E, \quad (4.5)$$

onde m_c representa a massa do quark charme e E a energia obtida numericamente [10]. Essa expressão decorre da aproximação não relativística adotada para o sistema $c\bar{c}$: a massa total do méson é escrita, de forma aproximada, como a soma das massas do quark e do antiquark, acrescida da energia de ligação associada ao potencial efetivo. Como o charmônio é formado por um quark charme e um antiquark charme, ambos com a mesma massa, temos 2 vezes a massa ($2m_c$). Os resultados calculados foram então associados aos estados espectroscópicos correspondentes e comparados com os valores experimentais compilados pelo Particle Data Group (PDG [9]), permitindo avaliar a capacidade do potencial de Cornell em reproduzir a estrutura espectral observada para o sistema .

4.3 Resultados

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos a partir da resolução numérica da equação de Schrodinger para o sistema charmônio utilizando o potencial efetivo descrito no capítulo anterior. A partir dos autovalores de energia calculados, foram determinadas as massas dos estados ligados $c\bar{c}$ para diferentes combinações dos números quânticos radiais e orbitais.

Com o objetivo de avaliar a precisão do modelo adotado, os resultados obtidos foram comparados tanto com valores teóricos encontrados na literatura quanto com os dados experimentais compilados pelo PDG [9]. Essa comparação permite verificar a capacidade do potencial utilizado em reproduzir a estrutura espectral observada para o sistema charmônio.

A Tabela 4.2 apresenta os estados calculados neste trabalho, juntamente com suas respectivas notações espectroscópicas (J^{PC})⁴, as massas obtidas numericamente, os valores reportados por [10] e, quando disponíveis, os valores experimentais do PDG [9].

De maneira geral, observa-se uma excelente concordância entre os resultados obtidos neste trabalho e os valores experimentais disponíveis. Para os estados fundamentais do sistema, as diferenças observadas são da ordem de poucos MeV .

O estado fundamental $\eta_c(1S)$, por exemplo, foi obtido com massa de $2.9846 GeV$, em excelente acordo com o valor experimental de $2.9841 GeV$ reportado pelo PDG [9].

⁴ A notação J^{PC} representa os números quânticos de um méson, onde J corresponde ao momento angular total, P à paridade e C à conjugação de carga. Essa classificação é amplamente utilizada na espectroscopia de quarkônios para identificar os diferentes estados ligados.

De forma semelhante, o estado $J/\psi(1S)$ apresentou massa calculada de 3.1606 GeV , próxima do valor experimental de 3.0969 GeV . Os desvios encontrados permanecem compatíveis com aqueles normalmente observados em modelos não relativísticos baseados no potencial de Cornell.

Estado	J^{PC}	Nome	Este trabalho	Artigo [10]	PDG [9]
1^1S_0	0^{-+}	$\eta_c(1S)$	2.9846	2.9832	2.9841
2^1S_0	0^{-+}	$\eta_c(2S)$	3.58767	3.5861	3.6378
3^1S_0	0^{-+}	$\eta_c(3S)$	4.00107	3.9995	-----
4^1S_0	0^{-+}	$\eta_c(4S)$	4.34876	4.3472	-----
5^1S_0	0^{-+}	$\eta_c(5S)$	4.65922	-----	-----
1^3S_1	1^{--}	$J/\Psi(1S)$	3.16061	3.1589	3.0969
2^3S_1	1^{--}	$\Psi(2S)$	3.6892	3.6875	3.686097
3^3S_1	1^{--}	$\Psi(3S)$	4.08355	4.0819	-----
4^3S_1	1^{--}	$\Psi(4S)$	4.42143	4.4199	-----
5^3S_1	1^{--}	$\Psi(5S)$	4.72555	4.7241	-----
1^1P_1	1^{+-}	$h_c(1P)$	3.51431	3.5126	3.52537
2^1P_1	1^{+-}	$h_c(2P)$	3.92944	3.9278	-----
3^1P_1	1^{+-}	$h_c(3P)$	4.28001	4.2784	-----
1^3P_0	0^{++}	$\chi_{c0}(1P)$	3.51498	3.5132	3.41471
2^3P_0	0^{++}	$\chi_{c0}(2P)$	3.93041	3.9287	-----
3^3P_0	0^{++}	$\chi_{c0}(3P)$	4.28119	4.2796	-----
4^3P_0	0^{++}	$\chi_{c0}(4P)$	4.59443	4.5929	-----
1^3P_1	1^{++}	$\chi_{c1}(1P)$	3.51498	3.5132	3.51067
2^3P_1	1^{++}	$\chi_{c1}(2P)$	3.93041	3.9287	-----
3^3P_1	1^{++}	$\chi_{c1}(3P)$	4.28119	4.2796	-----
1^3P_2	2^{++}	$\chi_{c2}(1P)$	3.51498	3.5132	3.55617
2^3P_2	2^{++}	$\chi_{c2}(2P)$	3.93041	3.9287	-----
3^3P_2	2^{++}	$\chi_{c2}(3P)$	4.28119	4.2796	-----
1^3D_2	2^{--}	$\Psi_2(1D)$	3.77695	3.7752	-----
1^3D_3	3^{--}	$\Psi_3(1D)$	3.77695	3.7752	-----

Tabela 4.2: Massas dos estados de charmônio obtidas pelo método descrito no Capítulo 4.2 comparadas com resultados teóricos da literatura e com os valores experimentais compilados pelo Particle Data Group [9]. Todas as massas são apresentadas em GeV.

Para diversos estados excitados previstos pelo modelo, ainda não existem medidas experimentais suficientemente precisas ou atribuições espectroscópicas definitivas.

Nesses casos, os resultados apresentados constituem previsões teóricas do modelo adotado e podem servir como referência para futuras investigações experimentais.

A presença desses estados evidencia uma das principais vantagens dos modelos de potencial: além de reproduzir partículas já observadas, eles permitem prever a existência e as propriedades de estados ainda não completamente estabelecidos experimentalmente.

Além da comparação direta entre os estados cuja atribuição espectroscópica já é bem estabelecida, é possível utilizar os resultados obtidos para investigar a possível natureza de algumas ressonâncias observadas experimentalmente. Para isso, as massas calculadas foram comparadas com os valores compilados pelo PDG [9], buscando identificar quais estados previstos pelo modelo apresentam maior compatibilidade com as partículas observadas.

A Tabela 4.3 apresenta as associações propostas neste trabalho. Em cada caso, a identificação foi realizada com base na proximidade entre a massa calculada e a massa experimental reportada pelo PDG [9], levando em consideração também os números quânticos previstos pelo modelo.

Charmônio	J^{PC}	Meu trabalho	Estado	PDG	Margem de erro PDG
$\Psi(4040)$	1^{--}	4.08355	$\Psi(3S)$	4.0396	± 0.0043
$\Psi(4415)$	1^{--}	4.42143	$\Psi(4S)$	4.415	± 0.005
$\Psi(4660)$	1^{--}	4.72555	$\Psi(5S)$	4.623	± 0.010
$\Psi_2(3823)$	2^{--}	3.77695	$\Psi_2(1D)$	3.82351	± 0.00034
$\Psi_3(3842)$	3^{--}	3.77695	$\Psi_3(1D)$	3.84271	$\pm 0.00012 \pm 0.00016$
$\chi_{c0}(3860)$	0^{++}	3.93041	$\chi_{c0}(2P)$	3.862	$\pm 0.0026 \pm 0.004$
$\chi_{c0}(4500)$	0^{++}	4.59443	$\chi_{c0}(4P)$	4.474	± 0.0044

Tabela 4.3: Possíveis associações entre estados de charmônio observados experimentalmente e os estados espectroscópicos previstos pelo modelo desenvolvido neste trabalho. São apresentados os valores de massa calculados, as correspondentes identificações espectroscópicas propostas e os valores experimentais reportados pelo Particle Data Group [9].

Observa-se que diversas ressonâncias conhecidas do espectro do charmônio podem ser associadas de forma natural aos estados previstos pelo modelo. O estado $\psi(4040)$, por exemplo, apresenta excelente concordância com o estado $\psi(3S)$, enquanto as ressonâncias $\psi(4415)$ e $\psi(4660)$ mostram compatibilidade com os estados $\psi(4S)$ e $\psi(5S)$, respectivamente.

As diferenças observadas entre os valores calculados e experimentais permanecem pequenas quando comparadas à escala típica das massas envolvidas. Embora tais

associações devam ser interpretadas com cautela, elas demonstram o potencial do modelo para auxiliar na classificação espectroscópica de ressonâncias observadas experimentalmente.

Ainda que a Tabela 4.1 apresente quantitativamente as massas calculadas para os diferentes estados do sistema $c\bar{c}$, uma representação gráfica do espectro facilita a visualização da organização dos níveis de energia previstos pelo modelo. O Gráfico 4.1 mostra a distribuição das massas obtidas neste trabalho em função dos respectivos números quânticos J^{PC} , permitindo identificar as diferentes famílias espectroscópicas associadas aos estados S , P e D .

Observa-se que os estados pertencentes a uma mesma família apresentam comportamento sistemático, com aumento gradual da massa à medida que cresce o número quântico radial. Esse comportamento está diretamente relacionado à maior energia de ligação dos estados excitados, refletindo a estrutura do potencial efetivo utilizado na resolução da equação de Schrodinger.

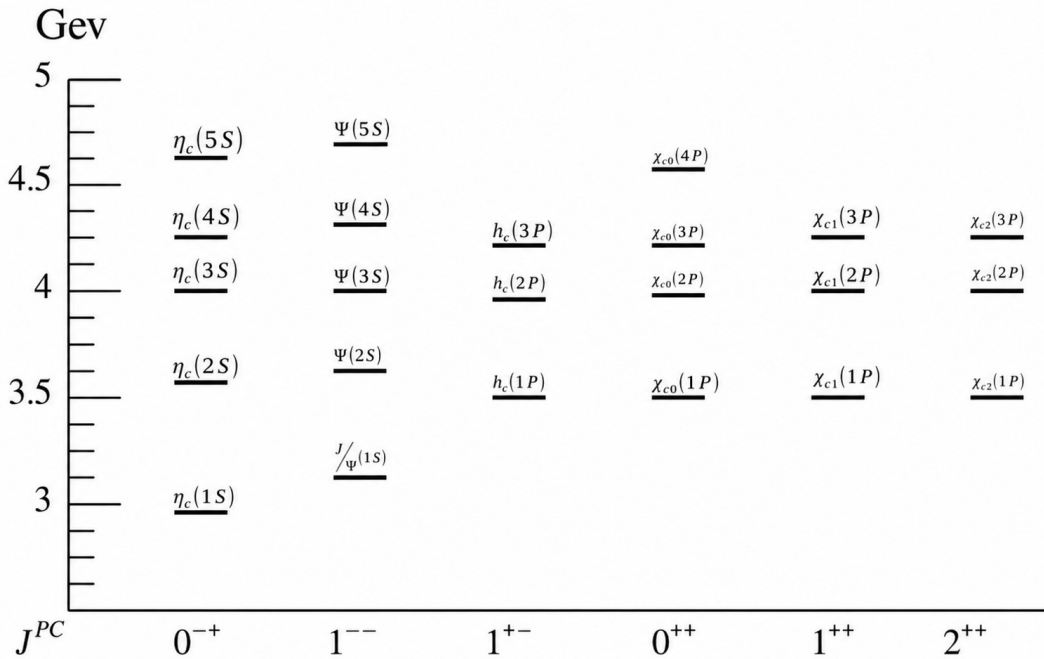


Gráfico 4.1: Espectro de massas dos estados ligados do sistema $c\bar{c}$ obtido neste trabalho por meio da resolução numérica da equação de Schrodinger com o potencial efetivo adotado. O eixo vertical representa as massas dos estados em GeV, enquanto o eixo horizontal organiza os estados de acordo com seus números quânticos J^{PC} . Cada linha horizontal corresponde à massa calculada para um estado espectroscópico específico, identificado pelo respectivo nome (η_c , J/ψ , h_c , χ_c , η_c , J/ψ , entre outros).

Por mais que o espectro calculado reproduza a estrutura esperada para os estados ligados do sistema $c\bar{c}$, sua validação depende da comparação com resultados experimentais. Para essa finalidade, os níveis de energia obtidos foram confrontados com as massas compiladas pelo PDG [9], permitindo avaliar quantitativamente a capacidade preditiva do modelo.

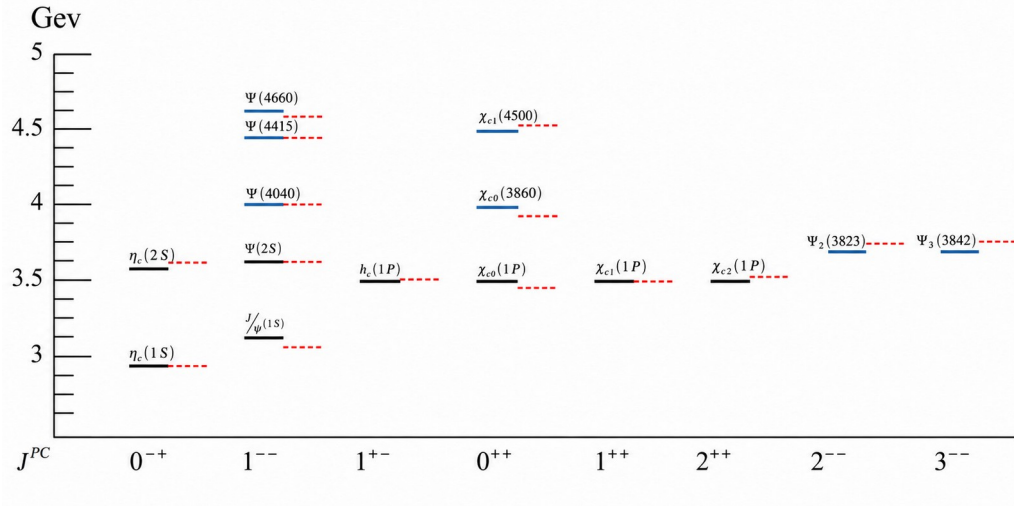


Gráfico 4.2: Comparação entre o espectro de massas calculado neste trabalho e os valores experimentais compilados pelo PDG [9]. O eixo vertical representa a massa dos estados em GeV, enquanto o eixo horizontal agrupa os estados segundo seus números quânticos J^{PC} . As linhas horizontais pretas correspondem às massas obtidas numericamente neste trabalho e as azuis também, apenas com a ressalva de que essas representam a associação feita na Tabela 4.3, enquanto as linhas vermelhas tracejadas representam os valores experimentais do PDG [9] para os estados correspondentes. A proximidade entre as linhas evidencia o grau de concordância entre o modelo e os dados experimentais.

De maneira geral, observa-se excelente concordância entre os resultados teóricos e experimentais. Para a maioria dos estados analisados, as diferenças entre as massas calculadas e os valores do PDG [9] permanecem pequenas, indicando que o potencial efetivo empregado reproduz satisfatoriamente a estrutura global do espectro do charmônio.

Para estimar um erro dos valores obtidos neste trabalho, comparei diretamente os resultados numéricos com os obtidos pelo artigo [10] e ao PDG [9] e realizei a diferença absoluta de cada estado,

$$\Delta_r = |M_{\text{trabalho}} - M_{\text{referência}}|, \quad (4.6)$$

onde o subíndice r no termo Δ é a referência usada. Os resultados estão representados na Tabela 4.4.

Estado	$\Delta_{[10]}$	$\Delta_{[9]}$
$\eta_c(1S)$	0.0014	0.0005
$\eta_c(2S)$	0.00157	0.05013
$\eta_c(3S)$	0.00157	-----
$\eta_c(4S)$	0.00156	-----
$\eta_c(5S)$	-----	-----
$J/\Psi(1S)$	0.00171	0.06371
$\Psi(2S)$	0.00170	0.00310
$\Psi(3S)$	0.00165	-----
$\Psi(4S)$	0.00153	-----
$\Psi(5S)$	0.00145	-----
$h_c(1P)$	0.00171	0.001106
$h_c(2P)$	0.00164	-----
$h_c(3P)$	0.00161	-----
$\chi_{c0}(1P)$	0.00178	0.10027
$\chi_{c0}(2P)$	0.00154	-----
$\chi_{c0}(3P)$	0.00159	-----
$\chi_{c0}(4P)$	0.00153	-----
$\chi_{c1}(1P)$	0.00178	0.00331
$\chi_{c1}(2P)$	0.00154	-----
$\chi_{c1}(3P)$	0.00159	-----
$\chi_{c2}(1P)$	0.00178	0.04119
$\chi_{c2}(2P)$	0.00154	-----
$\chi_{c2}(3P)$	0.00159	-----
$\Psi_2(1D)$	0.00175	-----
$\Psi_3(1D)$	0.00175	-----

Tabela 4.4: Diferença absoluta entre as massas obtidas neste trabalho e os valores de referência do artigo [10] e do Particle Data Group [9].

Além disso, calculei a porcentagem das diferenças dadas pela Tabela 4.4 dos estados que tiveram a menor e a maior diferença absoluta, as quais são, respectivamente, $\eta_c(1S)$ e $\chi_{c0}(1P)$ para ambas as referências. Os resultados obtidos foram de 0,04% a 0,05% em relação ao artigo [10] e 0,017% a 2,93% em comparação ao PDG [9].

As pequenas discrepâncias observadas são compatíveis com as limitações inerentes ao tratamento não relativístico e à ausência de alguns efeitos de ordem superior, como correções relativísticas, interações tensorais e o acoplamento spin-órbita.

Essa comparação evidencia que, apesar de sua simplicidade, o potencial de Cornell acrescido da interação hiperfina constitui uma aproximação eficaz para a descrição espectroscópica de sistemas formados por quarks pesados, reproduzindo com boa precisão tanto os estados já bem estabelecidos quanto diversas ressonâncias observadas experimentalmente.

Considerações Finais

5

O presente trabalho teve como objetivo investigar a espectroscopia do sistema harmônio por meio da resolução numérica da equação de Schrodinger utilizando um modelo não relativístico baseado no potencial de Cornell. Para isso, foi desenvolvido um percurso teórico e computacional que partiu de problemas fundamentais da Mecânica Quântica até alcançar a descrição de um sistema físico de interesse atual na Física de Partículas.

Inicialmente, foram revisados conceitos fundamentais necessários para a compreensão da dinâmica de estados ligados quânticos. A análise do poço de potencial infinito permitiu introduzir as ideias de quantização da energia e condições de contorno. Em seguida, o estudo do oscilador harmônico quântico evidenciou a riqueza matemática da Mecânica Quântica e a importância dos métodos analíticos na obtenção de soluções físicas. Posteriormente, a solução do átomo de hidrogênio forneceu o primeiro exemplo de um sistema descrito por um potencial central, exigindo a aplicação da técnica de separação de variáveis em coordenadas esféricas. Esse tratamento permitiu obter naturalmente os números quânticos, bem como as funções de onda estacionárias que caracterizam os estados ligados do sistema.

A partir dessa base conceitual, foi possível avançar para o estudo de sistemas mais complexos, nos quais soluções analíticas deixam de existir. Nesse contexto, a utilização de métodos numéricos mostrou-se fundamental. A aplicação desses métodos ao átomo de hidrogênio serviu como etapa intermediária de validação, demonstrando a capacidade das técnicas computacionais empregadas em reproduzir resultados conhecidos da literatura antes de serem aplicadas ao sistema de interesse principal deste trabalho.

O estudo do harmônio revelou-se particularmente interessante por representar uma ponte entre a Mecânica Quântica não relativística e a Física de Partículas. Embora a interação entre quarks seja, em princípio, descrita pela Cromodinâmica Quântica, a complexidade dos efeitos não perturbativos torna necessária a utilização de modelos efetivos. Nesse sentido, o potencial de Cornell, somado a interação spin-spin das partículas, mostrou-se capaz de incorporar, de forma simples e eficiente, as características únicas da interação forte.

A resolução numérica da equação radial de Schrodinger permitiu determinar os níveis de energia associados a diversos estados do sistema c.c. A partir desses resultados, foram calculadas as massas dos estados ligados e realizadas comparações tanto com previsões teóricas encontradas na literatura quanto com os valores experimentais compilados pelo Particle Data Group [9]. Os resultados

obtidos apresentaram boa concordância com os dados experimentais disponíveis, evidenciando que o modelo adotado é capaz de reproduzir satisfatoriamente a estrutura global do espectro do charmônio.

Além da reprodução de estados já estabelecidos experimentalmente, o trabalho permitiu discutir possíveis associações espectroscópicas para determinadas ressonâncias observadas no espectro do charmônio. Embora uma análise definitiva exija modelos mais sofisticados e a inclusão de efeitos adicionais, os resultados obtidos demonstram o potencial da abordagem empregada como ferramenta para o estudo e interpretação de sistemas formados por quarks pesados.

Um aspecto particularmente importante deste trabalho foi o desenvolvimento de competências relacionadas à modelagem matemática, programação científica e análise numérica. A utilização do software Wolfram não apenas possibilitou a obtenção dos resultados apresentados, mas também permitiu visualizar funções de onda, densidades de probabilidade e espectros de energia, contribuindo para uma compreensão mais profunda dos fenômenos estudados.

Cabe destacar que este trabalho também se insere em uma linha de pesquisa desenvolvida no âmbito do projeto do qual a autora participa, a Escola de Talentos do Instituto Principia. Estudos anteriores realizados por João Marques Bento P. Neto, Murilo Oliveira Pires e Matheus Roselli Ravani [15] exploraram a espectroscopia de quarkônios pesados utilizando abordagens semelhantes, servindo como importantes referências para o desenvolvimento desta monografia. A presente investigação busca dar continuidade a esses esforços, contribuindo para a consolidação das atividades de pesquisa desenvolvidas pelo grupo e ampliando a discussão sobre a aplicação de métodos numéricos ao estudo de sistemas hadrônicos.

Por fim, diversas extensões podem ser consideradas em trabalhos futuros. Entre elas destacam-se a inclusão de correções relativísticas, interações spin-órbita, termos tensoriais e efeitos dependentes de spin que não foram considerados explicitamente neste estudo. Além disso, a metodologia empregada pode ser aplicada ao sistema bottomônio ($b\bar{b}$) cuja maior massa dos constituintes torna a aproximação não relativística ainda mais adequada. Também seria interessante investigar estados exóticos recentemente observados experimentalmente, como tetraquarks e moléculas hadrônicas, cuja natureza permanece objeto de intenso debate na comunidade científica.

Mais do que a obtenção de resultados específicos, este trabalho evidencia como conceitos fundamentais da Mecânica Quântica, frequentemente apresentados de forma abstrata em cursos introdutórios, podem ser utilizados para compreender sistemas reais investigados na Física contemporânea. O caminho percorrido desde o poço de potencial infinito até a espectroscopia do charmônio demonstra que ferramentas matemáticas relativamente simples, quando combinadas com métodos numéricos adequados, são capazes de fornecer descrições notavelmente precisas de fenômenos que ocorrem na escala subatômica. Nesse sentido, espera-se que este trabalho contribua não apenas para o estudo do sistema $c\bar{c}$, mas também para

o fortalecimento da formação científica proporcionada pelo projeto e para futuras investigações na área de Física de Partículas.

-
- [1] Brian Robert Martin e Graham Shaw. **Particle physics**. 2008. isbn: 978-0-470-03294-7
 - [2] Rehm, Jeremy. **The four fundamental forces of nature**. Live Science (out. de 2019). URL: https://www.livescience.com/the-fundamental-forces-of-nature.html?utm_source=
 - [3] D. J. Griffiths e D. F. Schroeter. **Introduction to elementary particles**. 2008. isbn: 978-3-527-40601-2
 - [4] D. J. Griffiths. **Introduction to quantum mechanics**. 2ª ed. 2005. isbn: 0-13-191175-9
 - [5] Francis Halzen e Alan D. Martin. **Quarks and Leptons: An introductory course in modern particle physics**. 1984. isbn 0-471-88741-2
 - [6] K.S. Krane. **Modern Physics**. 3rd Edition. 2012. isbn: 9781118210093.
 - [7] George B. Arfken e Hans J. Weber. **Mathematical Methods for Physicists**. 7ª ed. 2007. isbn: 978-85-352-2050-6
 - [8] Mark Thomson. **Modern particle physics**. New York: Cambridge University Press, out. de 2013. isbn: 978-1-107-03426-6, 978-1-139-52536-7. doi: 10.1017/CBO9781139525367
 - [9] S. Navas *et al.* **Particle Data Group**. (2024) and 2025 update. Phys. Rev. D 110, 030001
 - [10] I. S. Alam e S. B. Maywenson. **Revisiting the charmonium spectra within the non-relativistic framework using the Matrix Numerov method**. J. Phys. Conf. Ser. 2498:1 (2023), 012013. doi: 10.1088/1742-6596/2498/1/012013
 - [11] Voloshin, M. B. **Charmonium**. Minneapolis: University of Minnesota, 2008. arXiv:0711.4556 [hep-ph].
 - [12] Augustin et al. **Discovery of a Narrow Resonance in e^+e^- Annihilation**. Physical Review Letters 33, 1406 (1974). doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.33.1406>
 - [13] Aubert et al. **Experimental Observation of a Heavy Particle J**. Physical Review Letters 33, 1404 (1974). doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.33.1404>
 - [14] A R Dzierba. **The search for QCD exotica**. Bulletin of the American Physical Society 40:10 (out. de 1995). URL: <https://www.osti.gov/biblio/255416>
 - [15] Marques Bento P. Neto, João; Oliveira Pires, Murilo e Roselli Ravani, Matheus. **A formação de estados de charmônio na QCD**. 2024. URL: <https://www.institutoprincipia.org/escola-de-talentos>



GATOS INSTÁVEIS

É possível construir aviões utilizando cola e fibra de carbono?

Melissa Katerberg Zanatta

Orientador: Prof. Dr. Volnei Tita

Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo



Instituto Principia

EESC- USP

**É POSSÍVEL CONSTRUIR AVIÕES UTILIZANDO
COLA E FIBRA DE CARBONO?**

Aluna: Melissa Katerberg Zanatta

Orientador: Prof. Dr. Volnei Tita

Introdução e Objetivos

Em 28 de abril de 1988, o voo 243 da Aloha Airlines transformou-se em um dos acidentes estruturais mais emblemáticos da história da aviação. Durante o cruzeiro a aproximadamente 24 mil pés de altitude, uma extensa seção da fuselagem superior de um Boeing 737 se desprendeu em voo devido à propagação de trincas causadas por fadiga do material. Embora a tripulação tenha conseguido realizar um pouso de emergência, o acidente evidenciou os limites dos materiais metálicos tradicionais quando submetidos a décadas de carregamentos cíclicos, variações de pressão e ambientes corrosivos.



Legenda: acidente aéreo ,Aloha airlines, voo 243;

https://www.reddit.com/r/CatastrophicFailure/comments/1kdwozt/aloha_airlines_flight_243_following_its_emergency/

Desde os primórdios da aviação, a busca por estruturas mais leves, resistentes e duráveis tem impulsionado o desenvolvimento de novos materiais. Durante grande parte do século XX, ligas de alumínio dominaram a construção aeronáutica devido à sua combinação de baixo peso e elevada resistência mecânica. Entretanto, problemas relacionados à fadiga, corrosão e custos de manutenção motivaram a indústria a buscar alternativas capazes de superar essas limitações.

Nesse contexto, os materiais compósitos ganharam destaque. Entre eles, os compósitos de fibra de carbono reforçados com resina epóxi (Carbon Fiber Reinforced Polymer – CFRP) passaram a ocupar papel fundamental na engenharia aeronáutica

moderna. Esses materiais apresentam elevada relação resistência-peso, excelente resistência à corrosão e comportamento diferenciado frente aos mecanismos de fadiga, características que contribuíram para sua adoção em aeronaves de última geração.

A utilização de diferentes materiais na construção de aeronaves acompanha a própria evolução da aviação. Nos primeiros anos do século XX, aeronaves como as desenvolvidas pelos pioneiros da aviação eram construídas principalmente com madeira, tecido e cabos metálicos, materiais que ofereciam baixo peso e relativa facilidade de fabricação para a tecnologia disponível na época. Entretanto, o aumento da velocidade, da capacidade de carga e das exigências operacionais tornou necessária a busca por materiais mais resistentes.

A partir das décadas de 1920 e 1930, estruturas metálicas passaram a substituir gradualmente a madeira. O alumínio e suas ligas destacaram-se devido à combinação entre leveza, resistência mecânica e facilidade de conformação. Durante boa parte do século XX, esse material tornou-se a principal matéria-prima da indústria aeronáutica, sendo empregado em fuselagens, asas e diversos componentes estruturais. O sucesso de aeronaves comerciais e militares desse período esteve diretamente ligado ao desenvolvimento de ligas metálicas cada vez mais eficientes.

Contudo, embora o alumínio tenha revolucionado a construção aeronáutica, seu uso também revelou limitações importantes. Problemas relacionados à corrosão, fadiga estrutural e necessidade constante de inspeção e manutenção passaram a representar desafios significativos para fabricantes e operadores. O crescimento da aviação comercial, aliado à busca por maior eficiência energética e redução do consumo de combustível, intensificou a necessidade de materiais capazes de oferecer maior resistência com menor peso.

Foi nesse cenário que os materiais compósitos começaram a ganhar espaço. Inicialmente empregados em componentes secundários, que não geram falha catastrófica da aeronave, esses materiais evoluíram rapidamente graças aos avanços nos processos de fabricação e no desenvolvimento de fibras de alto desempenho. Entre os diversos tipos de compósitos, os reforçados com fibra de carbono e resina epóxi destacaram-se por apresentar propriedades mecânicas superiores às de muitos materiais convencionais, além de elevada durabilidade e resistência aos efeitos do ambiente operacional.

Atualmente, aeronaves modernas utilizam grandes quantidades de compósitos estruturais em componentes críticos, como asas, fuselagens, estabilizadores e superfícies de controle. Essa transformação representa uma das maiores mudanças tecnológicas da história da engenharia aeronáutica, comparável à transição da madeira para o metal ocorrida no início do século passado. Dessa forma, compreender

a evolução dos materiais utilizados na aviação é fundamental para analisar como a combinação entre fibra de carbono e adesivos estruturais tornou possível a construção de aeronaves mais leves, eficientes e seguras.

Diante dessa evolução tecnológica, surge um questionamento que, à primeira vista, pode parecer simples, mas envolve conceitos avançados de engenharia de materiais e projeto aeronáutico: é possível construir um avião utilizando cola e fibra de carbono? A resposta exige compreender não apenas as propriedades dos materiais compósitos, mas também os métodos de fabricação, os mecanismos de união estrutural por adesivos e os requisitos de segurança exigidos pela indústria aeronáutica.

Este trabalho tem como objetivo analisar a viabilidade da construção de aeronaves empregando compósitos de fibra de carbono e resina epóxi, destacando a importância desses materiais na aviação moderna. Serão abordados os princípios de funcionamento dos compósitos, suas propriedades mecânicas, vantagens e limitações, bem como exemplos de aplicação em aeronaves comerciais contemporâneas. Além disso, será discutido como a utilização desses materiais tem contribuído para o aumento da eficiência estrutural, redução de peso, economia de combustível e melhoria da segurança operacional.

A relevância do tema justifica-se pelo crescimento contínuo da utilização de compósitos na indústria aeroespacial. Aeronaves modernas já possuem mais de 50% de sua estrutura composta por materiais compósitos, demonstrando que a combinação entre fibra de carbono e adesivos estruturais deixou de ser apenas uma alternativa experimental para se tornar uma das principais tecnologias da aviação do século XXI.

Motivação:

Diante desse cenário, a realização deste trabalho justifica-se pela relevância dos materiais compósitos para a engenharia aeronáutica moderna e pela necessidade de aprofundar o conhecimento sobre suas características, aplicações e impactos no desenvolvimento de aeronaves. O estudo desse tema permite compreender como a evolução dos materiais tem contribuído para o avanço tecnológico do setor, promovendo melhorias em eficiência, desempenho, segurança e sustentabilidade. Além disso, o conhecimento adquirido pode servir como base para futuras pesquisas e para a formação de profissionais capacitados a atuar em um mercado que demanda constante inovação tecnológica.

Portanto, a motivação para o desenvolvimento deste trabalho está relacionada à importância estratégica dos materiais compósitos no contexto da engenharia aeronáutica contemporânea, bem como ao seu potencial para atender às demandas atuais e futuras da indústria da aviação. A análise de suas propriedades, aplicações e desafios possibilita uma melhor compreensão de seu papel na construção de aeronaves cada vez mais eficientes, seguras e sustentáveis, reforçando a relevância do tema para a pesquisa acadêmica e para o desenvolvimento tecnológico do setor. Em suma, trata-se de um assunto muito atual que é sobre aviação sustentável, que em inglês vem sendo chamado de “green aviation”.

Metodologia:

Este trabalho caracteriza-se como uma pesquisa bibliográfica e aplicada, de abordagem qualitativa e quantitativa, desenvolvida com o objetivo de analisar a utilização de materiais compósitos na engenharia aeronáutica, com ênfase na fibra de carbono e nas juntas adesivas estruturais.

A etapa bibliográfica foi fundamentada em livros, artigos científicos e materiais técnicos especializados, bem como em cálculos empregando uma planilha Excel. Entre as principais referências utilizadas destacam-se as obras de Michael C. Y. Niu, reconhecido autor na área de estruturas aeronáuticas, além de material didático fornecido pelo orientador da pesquisa, Prof. Volnei Tita.

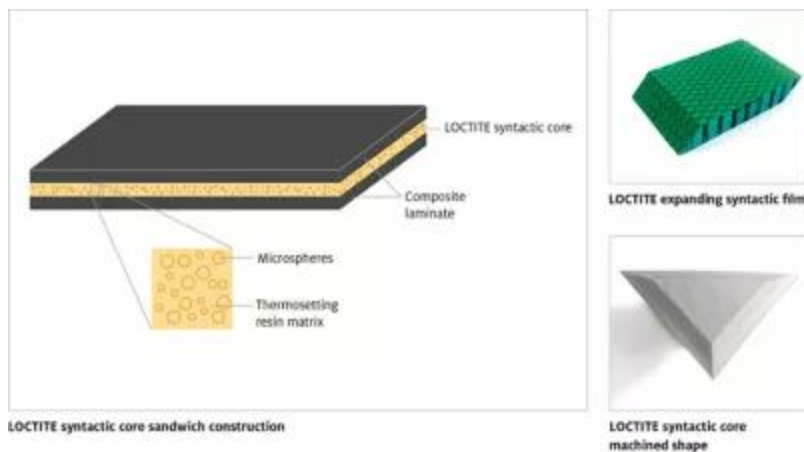
Inicialmente foi realizado um estudo dos conceitos fundamentais relacionados aos materiais compósitos, incluindo sua composição, propriedades mecânicas, classificação e aplicações na indústria aeronáutica.

Também foram estudados os princípios de funcionamento das juntas adesivas aeronáuticas, abordando suas vantagens em relação às uniões mecânicas convencionais, bem como suas limitações e aplicações estruturais.



Legenda: imagem da estrutura típica de um material compósito;

<https://fibrenamics.com/intelligence/relatorios/materiais-compositos-o-que-sao-e-quais-as-suas-propriedades>



Legenda: imagem da estrutura típica de uma junta adesiva aeronáutica;
<https://www.henkel-adhesives.com/br/pt/setores-industriais/industria-aeroespacial/adesivos-estruturais-para-industria-aeroespacial.html>

As juntas adesivas aeronáuticas são sistemas de união utilizados para conectar dois ou mais componentes estruturais por meio de um adesivo de alto desempenho, eliminando ou reduzindo a necessidade de elementos de fixação mecânica, como rebites e parafusos. Esse tipo de junta é amplamente empregado na indústria aeronáutica moderna devido ao crescente uso de materiais compósitos e à necessidade de fabricar estruturas mais leves, resistentes e duráveis. Os adesivos utilizados nessas aplicações são desenvolvidos especificamente para suportar elevadas cargas mecânicas, variações de temperatura, vibrações, umidade, combustíveis e outros agentes agressivos encontrados durante a operação de uma aeronave.

O princípio de funcionamento de uma junta adesiva baseia-se na formação de uma ligação resistente entre o adesivo e as superfícies dos materiais que serão unidos. Após sua aplicação, o adesivo preenche as irregularidades microscópicas presentes nas superfícies, estabelecendo uma íntima interação com o substrato. Durante o processo de cura, que pode ocorrer à temperatura ambiente ou em condições controladas de temperatura e pressão, as moléculas do adesivo sofrem reações químicas que promovem sua polimerização e endurecimento. Ao final desse processo, forma-se uma camada sólida capaz de transmitir os esforços mecânicos entre os componentes unidos.

A transferência de carga em uma junta adesiva ocorre de maneira contínua ao longo de toda a área colada. Diferentemente das juntas rebitadas ou parafusadas, nas quais as cargas são concentradas em poucos pontos correspondentes aos furos dos fixadores, as juntas adesivas distribuem os esforços por toda a superfície de contato. Essa distribuição mais uniforme reduz significativamente as concentrações de tensão, diminuindo a probabilidade de iniciação de trincas e aumentando a resistência à fadiga da estrutura. Esse comportamento é particularmente importante em componentes

aeronáuticos, que estão constantemente sujeitos a carregamentos cíclicos decorrentes das etapas de decolagem, voo, turbulência e pouso.

A eficiência de uma junta adesiva depende diretamente da preparação adequada das superfícies a serem unidas. Antes da aplicação do adesivo, os materiais passam por processos de limpeza para remoção de óleos, poeira, umidade e outros contaminantes que possam comprometer a aderência. Em seguida, normalmente são realizados tratamentos superficiais, como lixamento, jateamento ou tratamentos químicos, que aumentam a rugosidade da superfície e favorecem a ancoragem mecânica do adesivo. Em alguns casos, também são utilizados primers, que melhoram a adesão entre o adesivo e o material base, aumentando a durabilidade da junta.

Após a preparação das superfícies, o adesivo é aplicado de forma controlada, buscando manter uma espessura uniforme da camada adesiva. Em seguida, as peças são posicionadas e mantidas sob pressão durante o processo de cura, garantindo o contato adequado entre as superfícies. Dependendo do tipo de adesivo empregado, a cura pode ocorrer à temperatura ambiente ou em autoclaves e estufas, onde temperatura e pressão são rigorosamente controladas para assegurar o desenvolvimento completo das propriedades mecânicas do material.

Entre os adesivos mais utilizados na indústria aeronáutica destacam-se os adesivos à base de resina epóxi, devido à elevada resistência mecânica, excelente aderência a metais e materiais compósitos, alta resistência à fadiga e boa estabilidade térmica. Também podem ser empregados adesivos fenólicos, poliuretânicos e acrílicos, dependendo da aplicação e das condições de serviço exigidas para cada componente estrutural.

Uma das principais vantagens das juntas adesivas é a preservação da integridade estrutural dos materiais compósitos. Enquanto as juntas mecânicas exigem a realização de furos para instalação de rebites ou parafusos, interrompendo a continuidade das fibras de reforço e criando regiões de concentração de tensões, as juntas adesivas permitem unir os componentes sem perfurá-los. Dessa forma, as propriedades mecânicas do laminado são melhor preservadas, contribuindo para um desempenho estrutural superior.

Além disso, as juntas adesivas proporcionam significativa redução de massa, uma vez que diminuem ou eliminam a necessidade de fixadores metálicos. Na indústria aeronáutica, qualquer redução de peso representa uma importante vantagem, pois contribui para a diminuição do consumo de combustível, aumento da capacidade de carga útil e melhoria da eficiência operacional da aeronave. Outro benefício importante é a vedação proporcionada pelo adesivo, que dificulta a entrada de umidade e reduz a ocorrência de corrosão galvânica entre materiais diferentes, aumentando a durabilidade da estrutura.

Apesar de suas inúmeras vantagens, as juntas adesivas também apresentam algumas limitações. A qualidade da união depende fortemente da correta preparação das superfícies e do rigor no processo de fabricação. Pequenas falhas de limpeza, contaminação, aplicação inadequada do adesivo ou cura incompleta podem reduzir significativamente a resistência da junta. Além disso, alguns adesivos apresentam sensibilidade a temperaturas elevadas, impactos e condições ambientais severas, fatores que devem ser considerados durante o projeto estrutural.

Na engenharia aeronáutica moderna, as juntas adesivas são frequentemente utilizadas em conjunto com fixadores mecânicos, formando as chamadas juntas híbridas. Nessa configuração, o adesivo é responsável por distribuir uniformemente as tensões ao longo da interface, enquanto os rebites ou parafusos atuam como elementos de segurança, garantindo a integridade da união em situações extremas ou em caso de degradação parcial do adesivo. Essa combinação proporciona elevada confiabilidade estrutural e atende aos rigorosos requisitos de certificação exigidos pela indústria aeronáutica.

Dessa forma, as juntas adesivas constituem uma tecnologia fundamental para a fabricação de aeronaves modernas, especialmente aquelas que utilizam grandes quantidades de materiais compósitos, como o Boeing 787 Dreamliner e o Airbus A350. Sua capacidade de distribuir uniformemente os esforços mecânicos, preservar a integridade das fibras, reduzir a massa estrutural e aumentar a resistência à fadiga e à corrosão faz com que sejam indispensáveis no desenvolvimento de estruturas aeronáuticas mais leves, eficientes e seguras.

Aplicação da Lei das Misturas

Com o objetivo de avaliar a influência da fração volumétrica das fibras nas propriedades do compósito, foi utilizada a Lei das Misturas, amplamente empregada

na estimativa das propriedades mecânicas de materiais compósitos reforçados por fibras.

faz-se necessária as seguintes hipóteses:

- A lâmina é linear elástica e não possui tensões internas e térmicas;
- As fibras são uniformes, homogêneas, de mesmo diâmetro, contínuas, paralelas e regularmente espaçadas;
- A matriz é homogênea, isotrópica e apresenta comportamento linear elástico;
- Há uma perfeita ligação entre fibras e matriz bem como ausência de vazios;
- A interface é infinitamente fina, podendo ser desconsiderada nos cálculos.

volume. Considera-se um componente

fabricado em plástico reforçado com volume V_c e massa M_c , contendo fibras de mesmo diâmetro de

volume V_f e massa M_f , volume em resina (matriz) V_m e massa M_m , mas também volume de vazios

V_v . Nota-se que os subscritos c, f, m e v denotam compósito, fibra, matriz e vazios, respectivamente.

Em princípio é extremamente razoável considerar que:

$$M_c = M_f + M_m$$

$$V_c = V_f + V_m + V_v$$

As proporções relativas de matriz e fibra são obtidas através das frações de massa ou de volume.

(fração volumétrica) que podem ser encontradas dividindo respectivamente as equações anteriores por M_c e V_c . Portanto:

$$1 = \frac{M_f}{M_c} + \frac{M_m}{M_c}$$

$$1 = \frac{V_f}{V_c} + \frac{V_m}{V_c} + \frac{V_v}{V_c}$$

As frações de massa e volume são definidas como:

$$m_f = \frac{M_f}{M_c} ; \quad m_m = \frac{M_m}{M_c}$$

$$v_f = \frac{V_f}{V_c} ; \quad v_m = \frac{V_m}{V_c} ; \quad v_v = \frac{V_v}{V_c}$$

Assim pode-se reescrever as frações volumétricas da seguinte forma:

$$m_f + m_m = 1 \quad \text{ou} \quad \frac{\sum M_i}{M_c} = \sum m_i = 1$$

$$v_f + v_m + v_v = 1 \quad \text{ou} \quad \frac{\sum V_i}{V_c} = \sum v_i = 1$$

Para se estabelecer às relações entre as frações de massa e de volume, a densidade ρ_c do compósito deve ser determinada. Para tal pode-se utilizar as densidades dos elementos constituintes (fibra e matriz) e suas frações de massa e de volume.

Logo, a densidade ρ_c pode ser escrita em função somente das frações de massa ou em função das frações volumétricas. Dessa forma:

$$\rho_c = \frac{M_c}{V_c} = \frac{1}{\frac{V_c}{M_c}} = \frac{1}{\frac{V_f}{M_c} + \frac{V_m}{M_c} + \frac{V_v}{M_c}}$$

$$\rho_c = \frac{1}{\frac{M_f}{\rho_f M_c} + \frac{M_m}{\rho_m M_c} + \frac{V_v}{\rho_c V_c}} = \frac{1}{\frac{m_f}{\rho_f} + \frac{m_m}{\rho_m} + \frac{v_v}{\rho_c}}$$

Ou:

$$\rho_c = \frac{M_c}{V_c} = \frac{M_f + M_m}{V_c} = \frac{\rho_f V_f + \rho_m V_m}{V_c}$$

$$\rho_c = \rho_f v_f + \rho_m v_m$$

A fração de volume de vazios v_v é expresso da seguinte forma:

$$v_v = 1 - (v_f + v_m)$$

Ou então, em termos de massa e densidade.

$$v_v = 1 - \left(\frac{m_f}{\rho_f} + \frac{m_m}{\rho_m} \right) \rho_{c(\text{experimental})}$$

Além disso, tem-se que a densidade obtida teoricamente é dada por:

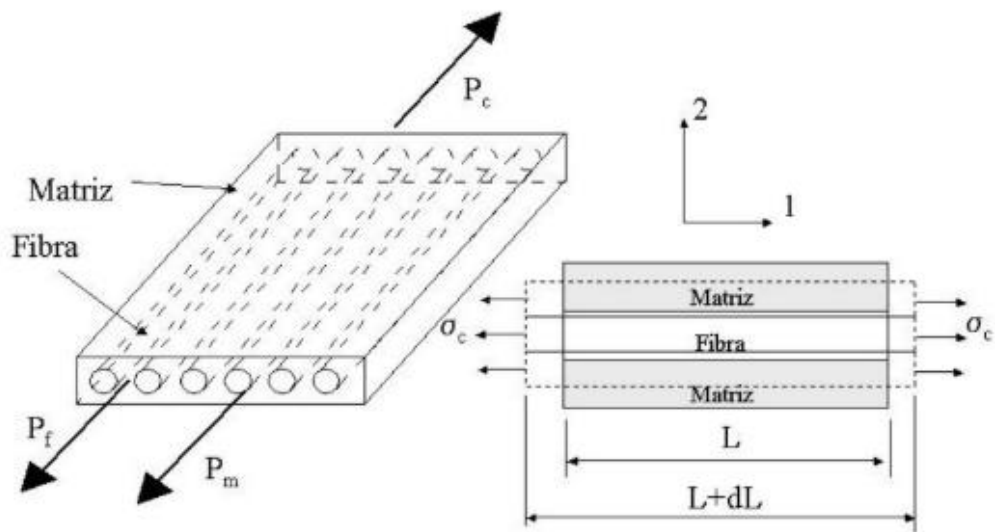
$$\rho_{c(\text{teórico})} = \frac{1}{\frac{m_f}{\rho_f} + \frac{m_m}{\rho_m}}$$

Portanto, a equação anterior pode ser escrita como:

$$v_v = 1 - \frac{\rho_{c(\text{experimental})}}{\rho_{c(\text{teórico})}}$$

Tendo-se assim, as frações volumétricas e as frações em massa, resta apenas conhecer os valores das propriedades da fibra e da matriz, ou seja, módulo de elasticidade da matriz (E_m) e da fibra (E_f) bem como o coeficiente de Poisson da matriz (ν_m) e da fibra (ν_f). Geralmente essas propriedades são fornecidas pelo fabricante, no entanto, em alguns casos torna-se necessário realizar ensaios mecânicos para caracterizar a fibra ou a matriz, caso o fabricante não possua tais informações.

Considerando as hipóteses impostas para o emprego da Regra das Misturas tem-se que na direção longitudinal ao se aplicar um dado carregamento P_c , as deformações das fibras, da matriz e do compósito nesta direção serão iguais. Dessa forma.



Como a fibra e a matriz apresentam comportamento elástico, as tensões são dadas pela Lei de Hooke:

$$\sigma_f = E_f \varepsilon_f \quad \text{e} \quad \sigma_m = E_m \varepsilon_m$$

As tensões σ_f e σ_m atuam nas seções transversais A_f e A_m respectivamente e são produzidas devido à ação do carregamento P_c aplicado na direção paralela às fibras. Verifica-se que o carregamento P_c pode ser dado pela soma dos carregamentos que atuam nas fibras e na matriz, ou seja:

$$P_c = P_f + P_m$$

Além disso:

$$P_f = \sigma_f A_f = E_f \varepsilon_f A_f \quad \text{e} \quad P_m = \sigma_m A_m = E_m \varepsilon_m A_m$$

Aplicando a última equação na penúltima, tem-se:

$$P_c = \sigma_c A_c = \sigma_f A_f + \sigma_m A_m \quad \text{ou} \quad \sigma_c = \sigma_f \frac{A_f}{A_c} + \sigma_m \frac{A_m}{A_c}$$

No entanto, o volume de fibra pode ser calculado da seguinte forma:

$$V_f = A_f l_f$$

De forma análoga pode-se obter o volume de matriz e o volume de compósito. Além disso, com base na figura mostrada, tem-se que:

$$l_f = l_m = l_c$$

Desde que a lâmina apresente comportamento um elástico de tal forma que, $\sigma_c = E_c \varepsilon_c$ e $\varepsilon_c = \varepsilon_m = \varepsilon_f$ tem-se:

$$E_{11} = E_f v_f + E_m v_m$$

A partir das equações obtidas, foram calculadas propriedades como densidade e módulo de elasticidade do compósito para diferentes proporções entre fibra e matriz.

Além do processo de dedução da lei das misturas é necessário o entendimento de outras variáveis utilizadas no processo, tais como, tensão, deformação, módulo de elasticidade na direção da fibra

1. Tensão mecânica:

A tensão mecânica é uma grandeza escalar que mede a intensidade da força aplicada sobre uma determinada área de um material.

$$T = \frac{F}{A}$$

2. Deformação mecânica

A deformação é a mudança nas dimensões ou na forma de um corpo quando ele é submetido a uma força. Ela é uma grandeza escalar e não possui unidade, pois é a razão entre dois comprimentos.

$$\varepsilon = \frac{L_f - L_0}{L_0}$$

3. Módulo de elasticidade na direção da fibra (E11)

O E_{11} representa o módulo de elasticidade na direção da fibra (direção longitudinal) em materiais anisotrópicos, como madeira e materiais compósitos

$$E_{11} = E_f v_f + E_m v_m$$

Construção dos gráficos

Os resultados obtidos por meio da Lei das Misturas foram organizados em planilhas eletrônicas utilizando o software Microsoft Excel.

Para cada propriedade analisada, foram inseridos os valores calculados em tabelas e posteriormente gerados gráficos de dispersão e gráficos de linhas, permitindo visualizar a relação entre a fração volumétrica de fibras e o desempenho do material compósito.

O procedimento adotado consistiu nas seguintes etapas:

1. Inserção dos dados calculados em planilhas;
2. Organização dos valores em colunas correspondentes às variáveis analisadas, tais como, tensão, deformação, módulo de elasticidade na direção da fibra;
3. Seleção dos dados;
4. Criação dos gráficos por meio da ferramenta "Inserir Gráfico";
5. Configuração dos eixos, legendas e títulos;
6. Análise das tendências observadas.

Resultados

Ef	vf	Em	vm	E11	Materiais
230	70%	3	30%	161,9	Carbono e Epóxi
230	60%	3	40%	139,2	Carbono e Epóxi
230	50%	3	50%	116,5	Carbono e Epóxi
230	40%	3	60%	93,8	Carbono e Epóxi
230	30%	3	70%	71,1	Carbono e Epóxi
230	20%	3	80%	48,4	Carbono e Epóxi
230	10%	3	90%	25,7	Carbono e Epóxi

(1)

Com o intuito de comparar a resistência entre os diferentes tipos de compósitos, foi necessário primeiro a criação de uma tabela para cada tipo, em cada tabela foi variado a porcentagem de fibra e de matriz e foi utilizado a média dos módulos de elasticidade fornecidos.

Analisando inicialmente a Tabela 1, é possível concluir que, quanto menor o módulo de elasticidade da fibra, menor será o módulo de elasticidade do compósito como um todo. Ou seja, quanto menor a fração de fibras presente no compósito, menor será sua rigidez, tornando-o mais suscetível à deformação quando submetido a cargas. Isso ocorre porque a maior parte da carga é suportada pela matriz, que possui um módulo de elasticidade inferior ao da fibra e, portanto, apresenta maior flexibilidade.

Os compósitos de fibra de carbono com resina epóxi são amplamente utilizados na indústria aeronáutica devido à sua elevada relação entre resistência mecânica e peso.

Esses materiais são empregados na fabricação de asas, fuselagens, estabilizadores, painéis estruturais e outros componentes de aeronaves, proporcionando redução significativa de massa, maior eficiência no consumo de combustível, elevada rigidez e excelente resistência à fadiga e à corrosão.

Ef	Ef	Em	vm	E11	Materiais
70	70%	3	30%	49,9	Fibra de vidro e Epóxi
70	60%	3	40%	43,2	Fibra de vidro e Epóxi
70	50%	3	50%	36,5	Fibra de vidro e Epóxi
70	40%	3	60%	29,8	Fibra de vidro e Epóxi
70	30%	3	70%	23,1	Fibra de vidro e Epóxi
70	20%	3	80%	16,4	Fibra de vidro e Epóxi
70	10%	3	90%	9,7	Fibra de vidro e Epóxi

(2)

A partir da lógica da tabela 1 foram construídas mais 3 tabelas com outros materiais relevantes na aeronáutica, neste exemplo foi utilizado a fibra de vidro e epóxi. É possível notar uma drástica redução nos valores do módulo de elasticidade em comparação com a fibra de carbono, ou seja, é um compósito com menor resistência.

A combinação de fibra de vidro com resina epóxi é amplamente utilizada devido ao seu bom equilíbrio entre resistência mecânica, baixo peso, resistência à corrosão e custo relativamente acessível. Suas principais aplicações incluem no meio aeronáutico incluem: fabricação de painéis, carenagens, radomes (capas de antenas de radar), interiores de aeronaves e componentes estruturais secundários.

Ef	vf	Em	vm	E11	Materiais
400	70%	3	30%	280,9	Boro e Epóxi
400	60%	3	40%	241,2	Boro e Epóxi
400	50%	3	50%	201,5	Boro e Epóxi
400	40%	3	60%	161,8	Boro e Epóxi
400	30%	3	70%	122,1	Boro e Epóxi
400	20%	3	80%	82,4	Boro e Epóxi
400	10%	3	90%	42,7	Boro e Epóxi

(3)

Seguindo a mesma linha de comparação é possível observar que nesse caso o módulo de elasticidade foi maior que o da fibra de carbono, sendo este compósito o mais resistente até então

Os compósitos de fibra de boro com resina epóxi são utilizados principalmente na indústria aeronáutica e aeroespacial devido ao seu elevado módulo de elasticidade e excelente resistência à compressão. Esses materiais são empregados no reforço estrutural de asas, fuselagens e outros componentes de aeronaves, especialmente em aplicações que exigem alta rigidez, baixo peso e elevada estabilidade dimensional. Apesar do excelente desempenho mecânico, seu uso é mais restrito em razão do alto custo de fabricação e da disponibilidade limitada quando comparado aos compósitos de fibra de carbono.

Ef	vf	Em	vm	E11	Materiais
400	70%	70	30%	301	Fibra de boro e alumínio
400	60%	70	40%	268	Fibra de boro e alumínio
400	50%	70	50%	235	Fibra de boro e alumínio
400	40%	70	60%	202	Fibra de boro e alumínio
400	30%	70	70%	169	Fibra de boro e alumínio
400	20%	70	80%	136	Fibra de boro e alumínio
400	10%	70	90%	103	Fibra de boro e alumínio

(4)

Fazendo novamente a análise em comparação aos outros compósitos esse é então o mais resistente dentre os quatro.

Os compósitos de fibra de boro reforçada com alumínio são utilizados principalmente na indústria aeronáutica e aeroespacial devido à sua elevada rigidez específica, alta resistência mecânica e excelente desempenho em temperaturas mais elevadas do que os compósitos com matriz polimérica. Esses materiais são empregados na fabricação de componentes estruturais, como longarinas de asas, painéis e reforços de fuselagens, onde são necessárias alta resistência, baixo peso e boa estabilidade dimensional. Entretanto, seu uso é limitado pelo elevado custo de produção e pela complexidade do processo de fabricação.

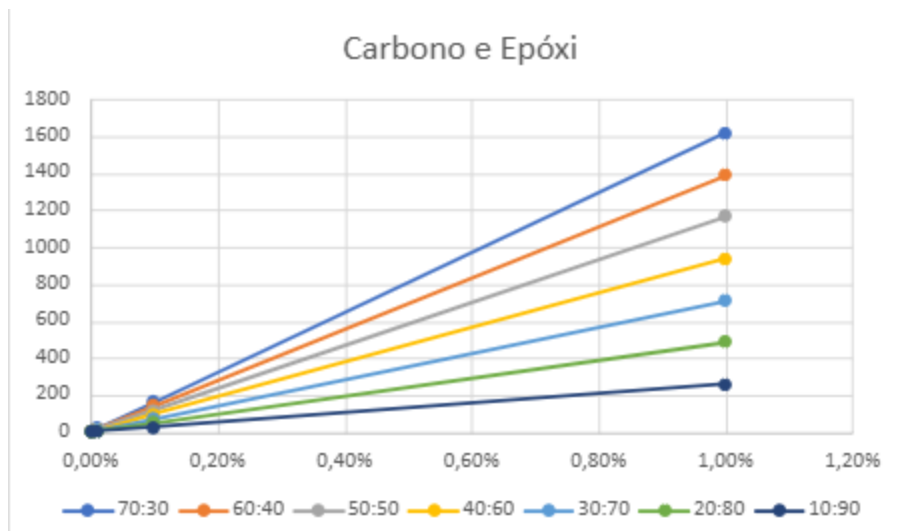
Utilizando os dados das tabelas, foram elaboradas novas tabelas com valores fixos de deformação, a fim de determinar, por meio da Lei de Hooke, o valor da tensão para cada compósito em diferentes proporções de fibra e matriz.

A partir dos resultados obtidos, é possível inferir que:

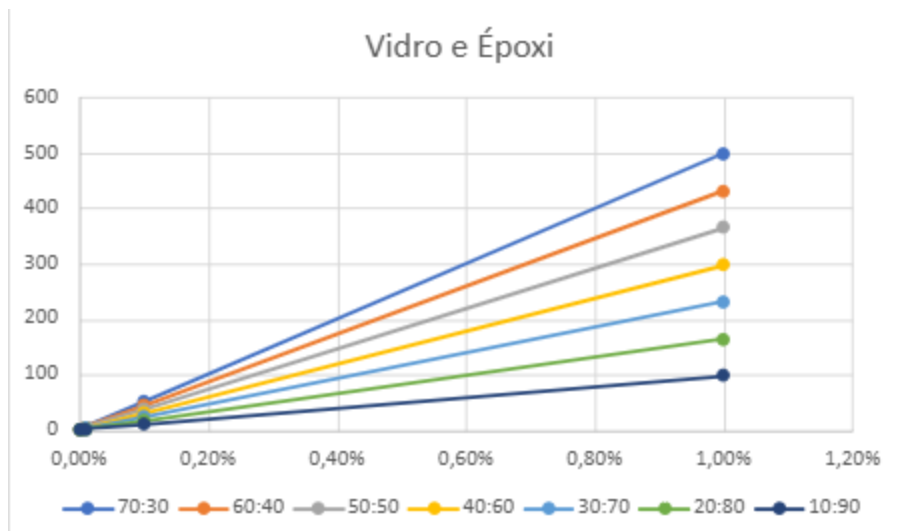
- Se o módulo de elasticidade longitudinal (E11) é baixo, é necessária uma deformação maior para atingir um mesmo valor de tensão, caracterizando um material menos rígido.
- Se o módulo de elasticidade longitudinal (E11) é alto, uma pequena deformação é suficiente para gerar uma tensão elevada, caracterizando um material mais rígido.

Deformação	V e E	B e E	C e E	K e P	B e A
0,00%	0	0	0	0	0
0,01%	4,99	28,09	16,19	9,19	30,1
0,10%	49,9	280,9	161,9	91,9	301
1,00%	499	2809	1619	919	3010
0,00%	0	0	0	0	0
0,01%	4,32	24,12	13,92	7,92	26,8
0,10%	43,2	241,2	139,2	79,2	268
1,00%	432	2412	1392	792	2680
0,00%	0	0	0	0	0
0,01%	3,65	20,15	11,65	6,65	23,5
0,10%	36,5	201,5	116,5	66,5	235
1,00%	365	2015	1165	665	2350
0,00%	0	0	0	0	0
0,01%	2,98	16,18	9,38	5,38	20,2
0,10%	29,8	161,8	93,8	53,8	202
1,00%	298	1618	938	538	2020
0,00%	0	0	0	0	0
0,01%	2,31	12,21	7,11	4,11	16,9
0,10%	23,1	122,1	71,1	41,1	169
1,00%	231	1221	711	411	1690
0,00%	0	0	0	0	0
0,01%	1,64	8,24	4,84	2,84	13,6
0,10%	16,4	82,4	48,4	28,4	136
1,00%	164	824	484	284	1360
0,00%	0	0	0	0	0
0,01%	0,97	4,27	2,57	1,57	10,3
0,10%	9,7	42,7	25,7	15,7	103
1,00%	97	427	257	157	1030

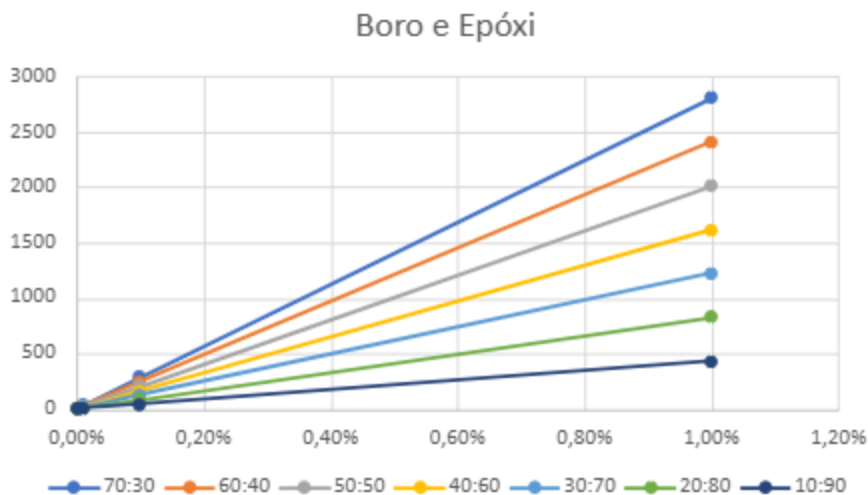
Para a comparação de todos os dados e uma análise mais profunda em relação a qual compósito teria a melhor performance, foram feitos gráficos de dispersão sendo as ordenadas a tensão aplicada no compósito e as abscissas a sua respectiva deformação.



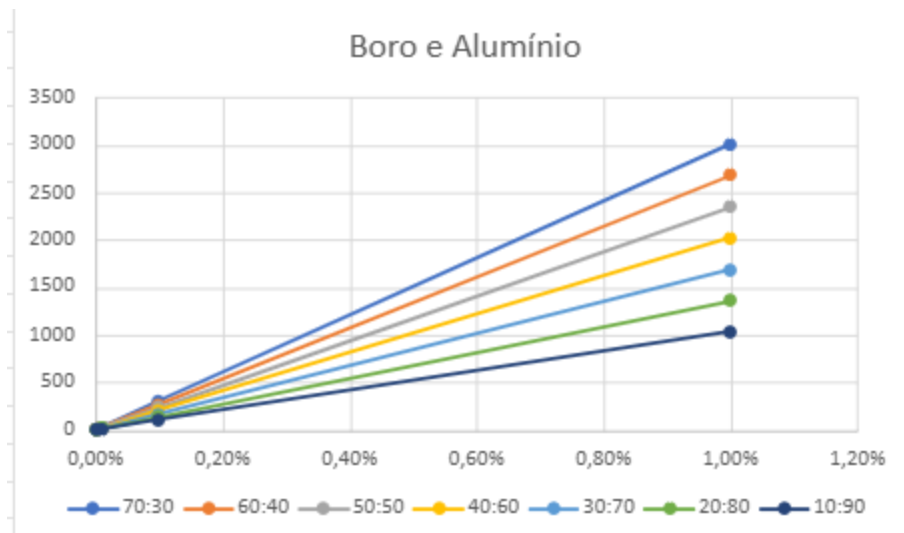
A análise das curvas tensão × deformação do compósito carbono/epóxi evidencia que o aumento da fração volumétrica de fibras promove um incremento progressivo na rigidez e na resistência mecânica do material. Observa-se que, à medida que a quantidade de fibra aumenta e a proporção de matriz diminui, a inclinação da região elástica torna-se mais acentuada, indicando um aumento do módulo de elasticidade. Esse comportamento está relacionado às elevadas propriedades mecânicas da fibra de carbono, que passa a suportar uma parcela cada vez maior do carregamento aplicado. Em contrapartida, a deformação na ruptura tende a ser reduzida, caracterizando um comportamento predominantemente frágil. Dessa forma, os resultados demonstram que a elevação da fração de fibras proporciona maior eficiência estrutural ao compósito, com aumento da capacidade de suportar tensões e redução da influência da matriz polimérica na resposta mecânica global.



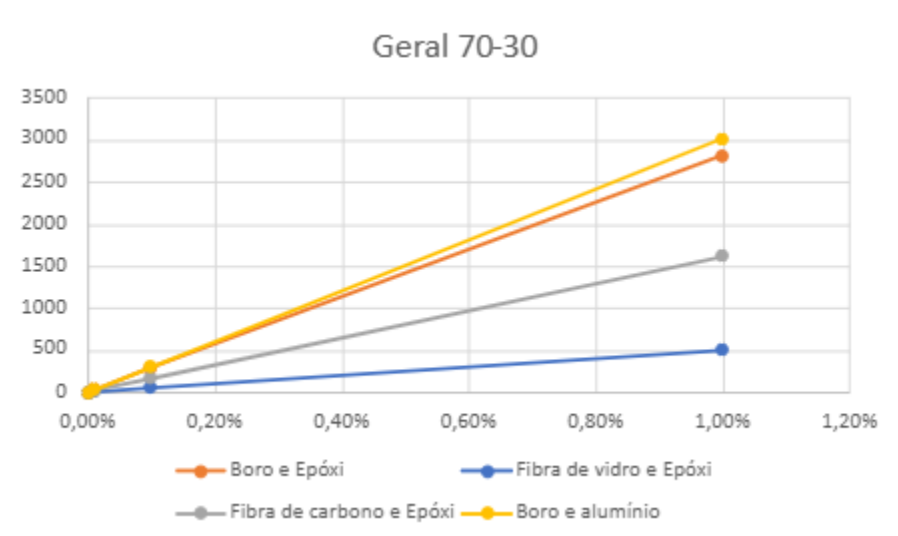
As curvas obtidas para o compósito vidro/epóxi mostram que o aumento da fração de fibras também resulta em elevação da rigidez e da resistência do material, embora esse efeito seja menos pronunciado quando comparado ao compósito reforçado com fibra de carbono. O aumento da inclinação da região elástica confirma que as fibras assumem gradativamente a maior parte dos esforços mecânicos, enquanto a redução da quantidade de matriz diminui sua participação na deformação do compósito. Entretanto, mesmo com maiores teores de fibra, observa-se que o material mantém uma capacidade de deformação relativamente superior, característica associada às propriedades da fibra de vidro. Esse comportamento evidencia um equilíbrio entre resistência e deformabilidade, tornando o compósito adequado para aplicações em que a absorção de energia e a tenacidade sejam características desejáveis.



Para o compósito boro/epóxi, as curvas tensão × deformação indicam que o aumento da fração volumétrica de fibras promove um acréscimo expressivo na rigidez do material, evidenciado pela maior inclinação da região elástica. Além do aumento do módulo de elasticidade, observa-se uma elevação da tensão máxima suportada pelo compósito, resultado das elevadas propriedades mecânicas da fibra de boro. Em contrapartida, a deformação na ruptura permanece reduzida, caracterizando um comportamento predominantemente elástico até a falha. Esses resultados demonstram que a incorporação de maiores quantidades de fibra de boro torna o compósito mais eficiente para aplicações que exigem elevada rigidez e resistência mecânica, embora com menor capacidade de deformação antes da ruptura.



O comportamento do compósito boro/alumínio apresenta diferenças em relação aos compósitos de matriz polimérica devido às características da matriz metálica. O aumento da fração de fibras resulta em maior rigidez e resistência mecânica, assim como observado nos demais materiais. No entanto, a presença do alumínio proporciona uma resposta mais dúctil, permitindo que o compósito suporte deformações adicionais após o início do escoamento da matriz. Dessa forma, as curvas tensão × deformação evidenciam uma combinação entre elevada rigidez, proporcionada pela fibra de boro, e maior capacidade de absorção de energia, decorrente da deformação plástica do alumínio. Esse comportamento torna o compósito particularmente adequado para aplicações estruturais submetidas a carregamentos elevados e que demandem maior tolerância à deformação.



O gráfico comparativo de tensão × deformação dos materiais compósitos, considerando a fração volumétrica de 70% de fibra e 30% de matriz, permite avaliar de forma mais abrangente o comportamento mecânico de cada material quando submetido a carregamentos. Observa-se que os compósitos reforçados com fibras de boro apresentam os maiores valores de tensão para uma mesma deformação, evidenciando sua elevada rigidez e resistência mecânica. Esse comportamento está diretamente relacionado ao elevado módulo de elasticidade da fibra de boro, que reduz significativamente as deformações sob carregamento e proporciona excelente capacidade de suportar esforços estruturais.

Entretanto, apesar do desempenho mecânico superior, os compósitos à base de fibra de boro apresentam limitações importantes relacionadas ao elevado custo de produção e ao processo de fabricação mais complexo. Esses fatores restringem sua aplicação em larga escala na indústria aeronáutica, sendo sua utilização direcionada principalmente para componentes específicos em que o desempenho estrutural extremo justifica o investimento.

Por outro lado, o compósito de fibra de carbono com matriz epóxi apresentou um comportamento mecânico bastante satisfatório, aproximando-se do desempenho dos compósitos de boro em termos de resistência, porém oferecendo vantagens adicionais relacionadas à baixa densidade do material. Essa característica resulta em uma elevada resistência específica (relação entre resistência mecânica e peso), considerada um dos parâmetros mais importantes para aplicações aeronáuticas. Quanto menor a massa estrutural da aeronave, menor será o consumo de combustível, maior será a capacidade de carga útil e melhor será a eficiência operacional ao longo da vida útil da aeronave.

O compósito reforçado com fibra de vidro apresentou comportamento inferior quando comparado aos materiais reforçados com fibra de carbono e fibra de boro. Embora possua menor custo de fabricação e boa resistência à corrosão, sua menor rigidez faz com que apresente maiores deformações sob os mesmos níveis de carregamento, limitando sua utilização em componentes estruturais sujeitos a elevados esforços mecânicos. Dessa forma, esse material torna-se mais adequado para aplicações secundárias, nas quais o custo reduzido representa um fator mais relevante que o desempenho mecânico.

A comparação entre os diferentes materiais evidencia que a escolha de um compósito para aplicações aeronáuticas não depende exclusivamente da maior resistência mecânica. A seleção do material envolve um equilíbrio entre propriedades mecânicas, densidade, custo de fabricação, facilidade de processamento e vida útil do componente. Sob esse aspecto, a fibra de carbono destaca-se como a alternativa mais vantajosa, pois reúne elevada resistência, alta rigidez, excelente resistência à fadiga,

baixa densidade e boa resistência à corrosão, características que justificam seu amplo emprego em aeronaves modernas.

Assim, os resultados obtidos por meio do gráfico confirmam que, embora os compósitos reforçados com fibra de boro apresentem o melhor desempenho mecânico entre os materiais analisados, o compósito de fibra de carbono com matriz epóxi representa a solução mais eficiente do ponto de vista técnico e econômico. Esse equilíbrio entre elevado desempenho estrutural e redução de massa explica sua ampla utilização na engenharia aeronáutica, sendo empregado em componentes primários de aeronaves modernas, como fuselagem, asas, estabilizadores e superfícies de controle, contribuindo diretamente para a melhoria da eficiência energética, da segurança estrutural e da redução dos custos operacionais.

Estudo de caso

Como forma de validar a relevância prática da aplicação dos materiais compósitos na indústria aeronáutica, foi realizado um estudo de caso da aeronave Boeing 787 Dreamliner, considerada um dos maiores marcos na utilização desses materiais em aeronaves comerciais de grande porte. A escolha dessa aeronave deve-se ao fato de representar uma mudança significativa nos conceitos de projeto estrutural, uma vez que grande parte de sua estrutura primária foi desenvolvida utilizando materiais compósitos reforçados com fibras de carbono, substituindo ligas metálicas tradicionalmente empregadas na fabricação aeronáutica.

O estudo teve como objetivo analisar de que maneira a utilização desses materiais influencia o desempenho global da aeronave, relacionando as propriedades

mecânicas dos compósitos aos ganhos obtidos em operação. Para isso, foram consultadas informações técnicas e dados disponibilizados por fabricantes e pela literatura especializada, permitindo avaliar os principais benefícios proporcionados pela substituição de componentes metálicos por estruturas compósitas.

Entre os aspectos analisados destacam-se a redução da massa estrutural, o aumento da eficiência no consumo de combustível, a elevada resistência à corrosão e à fadiga, além da melhoria do desempenho mecânico da aeronave. A diminuição do peso estrutural representa uma das principais vantagens da utilização de compósitos, uma vez que reduz a carga transportada pela aeronave durante todo o voo. Como consequência, ocorre uma redução do consumo de combustível, aumento da autonomia operacional e diminuição das emissões de gases poluentes, fatores que contribuem tanto para a redução dos custos operacionais quanto para a sustentabilidade do setor aeronáutico.

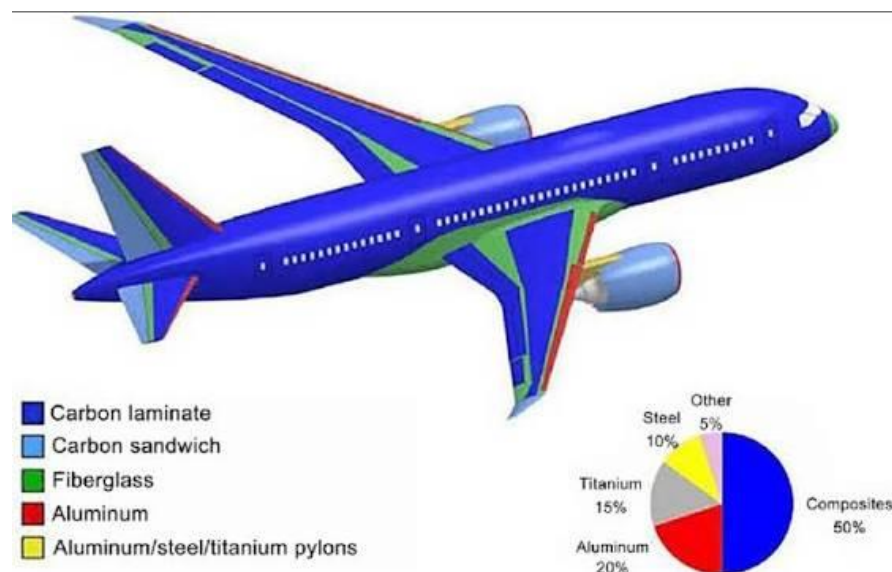
Outro aspecto relevante é a elevada relação entre resistência mecânica e massa específica apresentada pelos compósitos reforçados com fibras de carbono. Essa característica permite que componentes estruturais suportem elevados esforços mecânicos mantendo um peso significativamente inferior ao de estruturas metálicas equivalentes. Além disso, esses materiais apresentam excelente resistência aos processos de corrosão e maior resistência à propagação de trincas por fadiga, reduzindo a necessidade de inspeções frequentes e diminuindo os custos de manutenção ao longo da vida útil da aeronave.

A análise do Boeing 787 Dreamliner demonstra, portanto, que a adoção de materiais compósitos não representa apenas uma substituição de materiais convencionais, mas uma mudança de paradigma no desenvolvimento de estruturas aeronáuticas. As propriedades mecânicas desses materiais possibilitam a fabricação de componentes mais leves, resistentes e duráveis, proporcionando ganhos simultâneos de desempenho, segurança, eficiência energética e confiabilidade operacional.

Dessa forma, o estudo de caso complementa as análises teóricas e numéricas desenvolvidas neste trabalho, evidenciando que as vantagens previstas pelos modelos de comportamento mecânico dos materiais compósitos são efetivamente observadas em aplicações reais. O Boeing 787 Dreamliner constitui um exemplo consolidado da importância desses materiais para a engenharia aeronáutica contemporânea, demonstrando como a combinação de elevada rigidez, alta resistência específica e baixa densidade pode resultar em avanços significativos no desempenho e na eficiência das aeronaves modernas.



Legenda: Boeing 787 Dreamliner; https://en.wikipedia.org/wiki/Boeing_787_Dreamliner



Legenda: distribuição de materiais no Boeing 787 dreamliner;

https://www.researchgate.net/figure/Material-distribution-on-the-Boeing-787-8_fig2_314254904

Conclusões

A fibra de carbono destaca-se em relação a outros materiais de reforço utilizados em compósitos devido à sua elevada relação entre resistência mecânica e peso. Entre suas principais vantagens está o alto módulo de elasticidade, que proporciona maior rigidez ao compósito e reduz as deformações quando submetido a esforços mecânicos. Além disso, apresenta elevada resistência à tração, permitindo a fabricação de componentes leves e capazes de suportar cargas elevadas.

Outra vantagem importante é sua baixa densidade, que resulta em uma significativa redução de peso quando comparada a materiais metálicos, sem comprometer o desempenho mecânico. A fibra de carbono também possui excelente resistência à fadiga e à corrosão, aumentando a vida útil dos componentes mesmo em ambientes agressivos. Adicionalmente, apresenta baixo coeficiente de expansão térmica, garantindo maior estabilidade dimensional em aplicações sujeitas a variações de temperatura.

Em comparação com outros reforços, como a fibra de vidro, a fibra de carbono oferece maior rigidez e resistência específica, embora apresente custo mais elevado. Por esse motivo, é amplamente utilizada em setores que exigem alto desempenho, como as indústrias aeroespacial, automotiva, esportiva e de equipamentos de alta tecnologia, onde a redução de peso e o elevado desempenho estrutural justificam o investimento.

Em relação às juntas coladas, os resultados analisados demonstram que sua utilização proporciona vantagens significativas quando comparada às juntas mecânicas convencionais. A união por adesivos promove uma distribuição mais uniforme das tensões ao longo da região colada, reduzindo as concentrações de tensão que normalmente ocorrem em juntas rebitadas ou parafusadas. Além disso, por não exigir a perfuração dos laminados compósitos, preserva a continuidade das fibras de carbono, evitando perdas de resistência mecânica e diminuindo a possibilidade de iniciação de trincas. Esses fatores contribuem para um melhor

desempenho estrutural, maior resistência à fadiga e aumento da vida útil dos componentes.

Os resultados também evidenciam que a combinação entre materiais compósitos de fibra de carbono e juntas coladas possibilita a fabricação de estruturas mais leves e eficientes. No estudo de caso do Boeing 787 Dreamliner, observou-se que o emprego dessas tecnologias contribui para a redução da massa estrutural da aeronave, diminuindo o consumo de combustível e os custos de manutenção, além de aumentar a resistência à corrosão e à fadiga. Dessa forma, verifica-se que as juntas adesivas desempenham um papel fundamental na viabilização do uso extensivo de materiais compósitos em aeronaves modernas, potencializando as vantagens mecânicas e operacionais desses materiais.

Essa análise permitiu avaliar o potencial da fibra de carbono como principal material compósito empregado atualmente na engenharia aeronáutica, bem como compreender a importância das juntas adesivas na construção de estruturas aeronáuticas modernas. A discussão dos resultados evidencia que a associação entre compósitos de fibra de carbono e juntas coladas representa uma solução estrutural eficiente, capaz de proporcionar elevada resistência mecânica, redução de peso, maior durabilidade e melhor desempenho operacional, características essenciais para atender às exigências da indústria aeronáutica contemporânea.

Referências Bibliográficas

<https://air.flyingway.com/books/Airframe-Stuctural-Design.pdf>

<https://biopdi.com.br/artigos/modulo-de-elasticidade-ou-modulo-de-young/>

<https://www.sonelastic.com/pt/fundamentos/tabelas-propriedades-materiais/polimeros.html>

<https://boeing.mediaroom.com>

<https://ntrs.nasa.gov>

<https://graduacao.iqsc.usp.br/files/Materiais-Compósitos-2.pdf>

<http://www.gea.eesc.usp.br>

TITA, Volnei. Projeto e Fabricação de Estruturas em Material Compósito Polimérico. USP, São Carlos.

Agradecimentos:

Deus, Wellington, minha família, José Cid, Professores e Ricarditas.



GATOS INSTÁVEIS

Novas fronteiras da radioterapia: PET-Linac

Rafael Alcantara Cabrera

Orientadora: Profa. Dra. Juliana Fernandes Pavoni
Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da
Universidade de São Paulo



ESCOLA DE TALENTOS DO INSTITUTO PRINCIPIA
TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

Rafael Alcantara Cabrera

Novas Fronteiras da Radioterapia:
PET-LINAC

Orientadora:

Prof. Dra. Juliana Fernandes Pavoni

Coorientadores:

Bel. Victor Hugo Vasconcellos Nogueira Silva

Bela. Laiane Simões Mito

SÃO PAULO – SP

Julho de 2026

Novas Fronteiras da Radioterapia: PET-LINAC

Rafael Alcantara Cabrera¹, Laiane Simões Miotto², Victor Hugo V. Nogueira Silva², Juliana Fernandes Pavoni²

¹ Escola de Talentos – Instituto Principia, Rua Pamplona, 145, São Paulo - SP

² Universidade de São Paulo, Av. Bandeirantes, 3900, Ribeirão Preto - SP

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Instituto Principia e à Escola de Talentos que me deram total suporte durante todos os anos de curso e possibilitaram uma mudança profunda na minha vida, que mesmo sem ter noção do quanto mudou tenho certeza que mudou profundamente.

Gostaria de agradecer à Profa. Dra. Juliana Pavoni, que com a sua extensa experiência conduziu com maestria todos os trabalhos, apontando melhorias quando necessário e elogiando quando merecido. Quero agradecer também por ter aceitado este trabalho, que desde o começo nós os alunos tivemos interesse por esse tema.

Gostaria também de agradecer ao Victor Hugo, o meu coorientador, mas que foi mais como um orientador em todo o trabalho, me ajudando em horas difíceis, entendendo as minhas dificuldades e acima de tudo me orientando em como construir esse estudo, sem ele não seria possível ter este trabalho terminado. Obrigado!

Agradeço também à Laiane Simões que aceitou coorientar-me e aos meus colegas, que mesmo sem ter orientado um trabalho assim antes, aceitou o desafio e tutorou quatro alunos ao mesmo tempo e conduziu muito bem garantindo a qualidade de todos os trabalhos.

Agradeço à minha família especificamente ao meu pai Paulo Cabrera e à minha mãe Jerusa Carmela que me deram apoio incondicional nos momentos difíceis e que entenderam as minhas escolhas e necessidades que vieram com a minha entrada na Escola de Talentos. Além de também de sempre terem acreditado em mim, mesmo quando nem eu acreditava, me incentivando e me fortalecendo. Obrigado, eu amo vocês.

Agradeço também à minha namorada Sarah Grace, que se envolveu junto a mim no desenvolvimento do trabalho, que me ajudou quando precisei e entendeu quando eu tinha necessidades que a maioria das pessoas nessa idade não tem. Ela realizou um dos papéis mais difíceis durante todo o desenvolvimento deste estudo, fazendo com que mesmo cansado eu continue a me dedicar. Eu te amo!

E por último gostaria de agradecer também à Escola Interamérica, que sempre me incentivou a participar de diversas olimpíadas e ocupando um papel crucial para o meu desenvolvimento pessoal e educacional, sempre prezando pela saúde mental.

Resumo

Introdução: A carcinogênese é caracterizada por alterações genéticas e uma reprogramação metabólica que eleva substancialmente o consumo de nutrientes no tecido neoplásico. Essa hiperatividade é explorada pela Tomografia por Emissão de Pósitrons (PET), na qual radiofármacos acumulados na lesão emitem pósitrons que, ao se aniquilarem, geram sinais detectáveis em coincidência. A integração contínua desses dados funcionais com imagens anatômicas originou a Radioterapia Biologicamente Guiada (BgRT). Nessa modalidade inovadora, as emissões metabólicas atuam como um referencial dinâmico, permitindo que a própria biologia do tumor guie a entrega da dose em tempo real. Com validações clínicas já demonstrando resultados expressivos, a BgRT desponta como uma evolução promissora para a radioterapia. **Metodologia:** Realizou-se uma revisão da literatura baseada em artigos científicos para avaliar o fluxo operacional da BgRT e suas vantagens clínicas e dosimétricas, com destaque para a preservação de tecidos sadios e órgãos em risco (OARs). O estudo tomou como base as aplicações na plataforma RefleXion X1, atualmente o único sistema comercialmente disponível para essa modalidade. A eficácia da tecnologia foi avaliada em dois cenários anatômicos extremos: tumores pulmonares, que representam um desafio devido à alta mobilidade respiratória, e metástases ósseas, caracterizadas por alta densidade e estabilidade posicional. Essa comparação permitiu verificar a robustez e a exatidão do rastreamento do sinal biológico sob diferentes condições físicas e fisiológicas. **Conclusão:** A análise dos dados clínicos indica que a integração em tempo real do sinal PET eleva a precisão do planejamento e garante alta congruência entre a dose prescrita e a dose efetivamente entregue. A deposição de dose torna-se significativamente mais assertiva no volume alvo, reduzindo a irradiação de tecidos adjacentes e OARs, o que minimiza a probabilidade de toxicidades severas associadas ao tratamento. Conclui-se que a BgRT tem o potencial de mitigar as incertezas geométricas presentes na radioterapia convencional, com viabilidade para substituir gradativamente as técnicas atuais e estabelecer um novo padrão de excelência, segurança e conforto no tratamento oncológico.

Palavras-chave: Radioterapia; BgRT; PET-Linac; Adaptativa; IGRT.

Sumário

1	O CANCÊR E A RADIOTERAPIA	2
2	FEIXE DE MEGAVOLTAGEM	4
3	EFEITOS DA RADIAÇÃO IONIZANTE NA MATÉRIA	6
4	EFEITOS BIOLÓGICOS	8
5	RADIOTERAPIA GUIADA POR IMAGEM	9
6	RADIOTERAPIA ADAPTATIVA	12
7	RADIOTERAPIA BIOLOGICAMENTE GUIADA	13
8	REFLEXION X1	15
9	PLANEJAMENTO DO TRATAMENTO	16
10	ESTUDO CLÍNICO	19
11	CONCLUSÃO	20

Introdução

1 O CANCÊR E A RADIOTERAPIA

O câncer é um conjunto de doenças caracterizadas pelo crescimento descontrolado e desordenado de células, resultando na formação de massas tumorais que podem invadir tecidos adjacentes e se disseminar para outras regiões do organismo. Sua formação é decorrente de alguma mutação, ou então de algum problema genético que afeta mecanismos responsáveis pelo controle da proliferação celular, da diferenciação e da morte celular programada, como a mutação de oncogenes, genes supressores de tumores e genes estabilizadores de genoma. Dentre estes, destaca-se o TP53 que é o principal gene responsável por prevenir contra tumores, conhecido como “the guardian of the genome” e por exemplo mais da metade dos cânceres envolvem uma mutação do gene responsável, o TP53 [1]. A maioria dos tumores começa com a replicação exacerbada de células comuns no corpo, aumentando a probabilidade de mutações ocorrerem e se acumularem em um local comum, gerando o tumor.

O tumor apresenta cerca de oito características que divergem das células normais, sendo elas: replicação celular sem limites, angiogênese sustentável (formação de vasos condutores), evasão da apoptose (o “suicídio” celular), autossuficiência em sinais vitais, imunidade a sinais de anticrescimento, invasão tecidual e metástase, evasão da destruição do sistema imune e reprogramação da quantidade de energia metabólica. A diferença de metabolismo é a mais evidente diferença entre a célula sadia e a do tumor, devido às grandes demandas de ATP, NADPH, NADH e a presença de esqueletos de carbono que juntos aumentam muito o metabolismo normal para o cancerígeno [2].

A radioterapia é uma das modalidades terapêuticas para o tratamento do câncer, juntamente com a quimioterapia e a cirurgia. Estima-se que mais de 50% dos pacientes em tratamento oncológico realizem radioterapia em algum momento do seu tratamento. Seu objetivo é administrar uma dose de radiação ionizante ao tumor, suficientemente alta para destruir as células tumorais. Do ponto de vista físico e técnico, essa é uma tarefa difícil, pois os tumores malignos geralmente estão localizados perto de órgãos radiosensíveis. Alguns exemplos desses órgãos, dentre outros, seriam, no caso de tumores na região da cabeça, os olhos, os nervos ópticos, o tronco cerebral ou a medula espinhal; para tumores na pelve, os intestinos; ou para tumores no tórax, o tecido pulmonar. Esses órgãos, considerados de risco (OAR), não devem ser danificados durante a radioterapia [3].

A radioterapia divide-se em duas modalidades, a depender da posição da fonte radioativa. A primeira é a braquiterapia, que consiste na utilização de fontes implantadas (permanentemente ou não) no paciente. Nessa modalidade, os radionuclídeos emitem radiação ionizante que deposita sua energia localmente, permitindo a administração de altas doses no volume alvo com rápida redução da dose nos tecidos adjacentes saudáveis. A segunda é a teleterapia, na qual

as fontes são externas ao paciente. Os equipamentos mais usados para isso são os aceleradores lineares (AL). Para a utilização de fontes radioativas (^{137}Cs e ^{60}Co), é necessário que o material radioativo tenha alta intensidade, e por isso, é raramente encontrado em funcionamento nas clínicas brasileiras por questão de segurança e logística [4]. Vale lembrar do maior acidente radiológico do mundo, o caso do Césio-137 em Goiânia, que a máquina descartada pelo Instituto Goiano de Radioterapia tinha finalidade em teleterapia [5]. Os ALs aceleram elétrons com potenciais de megavoltagem, para produção de raios X a partir do freamento, ou mesmo para utilização diretamente dessas partículas. Desta forma, há maior controle da radiação produzida, o que é positivo tanto para a segurança contra exposição acidental quanto para o tratamento do paciente [6].

Com a introdução da radioterapia conformacional tridimensional, o controle tumoral e das doses de radiação em OAR foi aprimorado. Na radioterapia conformacional, a distribuição da dose no tecido é moldada de forma que a região de alta dose esteja localizada no volume alvo, com efeito terapêutico máximo em todo o volume. No tecido saudável adjacente, a dose de radiação deve ser mantida abaixo do limite que causa danos por radiação. Ao diminuir a dose no tecido saudável, a dose administrada ao volume alvo pode ser aumentada, uma vez que a toxicidade do tratamento deixa de ser um limitador [3].

O processo de tratamento da radioterapia abrange diferentes aspectos de elos de uma “cadeia de procedimentos” [3].

Imagem e localização de tumores: Atualmente, tumores e OAR são localizados com técnicas de imagem 3D. Os avanços na área de imagem médica, especialmente no uso de tomografia computadorizada (TC), ressonância magnética (RM) e tomografia por emissão de pósitrons (PET), levaram a uma maior precisão na localização de tumores.

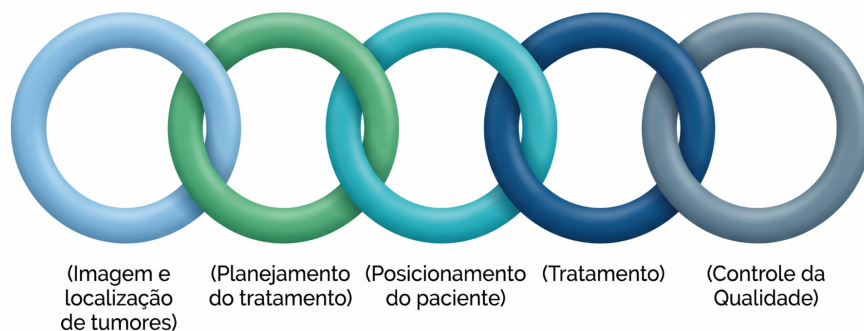
Planejamento do tratamento: O objetivo é determinar uma técnica de irradiação adequada e viável. O processo pode ser dividido nas seguintes etapas: (1) Determinação ou segmentação do volume alvo e dos órgãos de risco; (2) Simulação virtual da terapia; (3) Cálculo da dose; (4) Visualização e avaliação da distribuição da dose.

Posicionamento do paciente: O elo de ligação entre o planejamento do tratamento e a irradiação. O problema aqui é transferir com precisão a técnica de irradiação planejada para o paciente. Então, o paciente deve ser posicionado exatamente na mesma posição que durante a aquisição de imagens em 3D. Na radioterapia moderna, são utilizadas técnicas guiadas por imagem para minimizar erros de movimentações durante o tratamento. Essa abordagem trouxe avanços para adaptação da entrega das doses ao longo do tratamento, por meio do acompanhamento dinâmico das condições volumétricas e movimentações dos tumores.

Tratamento: O elo mais essencial na cadeia da radioterapia é o tratamento em si, caracterizado pela administração da radiação. A maioria dos tratamentos de radioterapia conformacional é realizada por meio de radiação externa com fótons produzidos pelo AL. Máquinas especializadas em terapia com partículas carregadas, como feixes de prótons, estão crescendo nas instalações de radioterapia em todo o mundo.

Controle e Garantia da Qualidade: Todas as etapas e elos da cadeia da radioterapia estão sujeitos a erros e imprecisões, o que pode levar ao fracasso do tratamento ou a danos ao paciente. Para evitar este desfecho indesejado, um sistema de gestão da qualidade obrigatoriamente deve ser implementado e deve abranger todos os componentes envolvidos e todos os aspetos da cadeia. A radioterapia engloba aspectos e componentes médicos, biológicos, de engenharia mecânica e eletrônica, ciência da computação, matemática e física, podendo ser considerada uma das técnicas de tratamento médico mais complexas e críticas disponíveis atualmente.

Figura 1.1: Cadeia de procedimentos da radioterapia. A figura ilustra como cada aspecto é importante para todo o processo em tratar o paciente com qualidade na radioterapia.



Fonte: Imagem gerada por inteligência artificial.

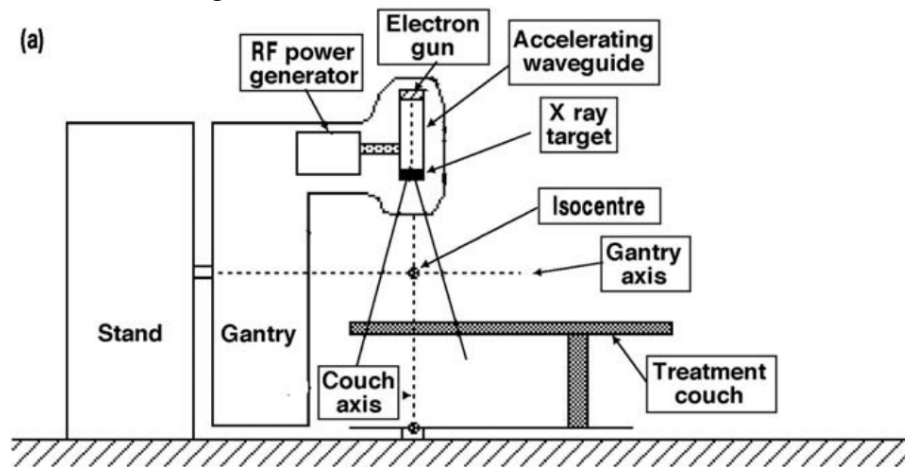
2 FEIXE DE MEGAVOLTAGEM

Na radioterapia o feixe de fótons é produzido em uma máquina chamada de AL. O seu princípio de funcionamento se baseia em acelerar elétrons, para adquirirem energia da ordem de mega electron-volts, e posteriormente, desacelerá-los em material de alto número atômico, produzindo fótons de alta energia [7]. Os ALs clínicos possuem três componentes fundamentais: fonte de elétrons, guia de ondas e o cabeçote.

A fonte de elétrons funciona como um sistema de injeção, sendo constituída por um cátodo e um ânodo dispostos em um espaço confinado sob alto vácuo, dotado de um pequeno orifício para a saída das partículas. No cátodo, que consiste em um filamento aquecido, uma nuvem de elétrons livres é gerada por meio do efeito termiônico. Essas partículas são então aceleradas pelo forte campo elétrico estabelecido entre o cátodo e o ânodo, sendo focalizadas em um feixe direcionado à guia de ondas com energias na ordem de quiloeltron-volts (keV) [7].

Paralelamente, o sistema depende de um gerador de radiofrequência, tipicamente um magnetron ou um klystron, que é o componente responsável por produzir as micro-ondas de

Figura 2.1: Diagrama simplificado de um linac clínico. O isocentro é um ponto no espaço onde o gantry, mesa e colimador giram em torno [7].



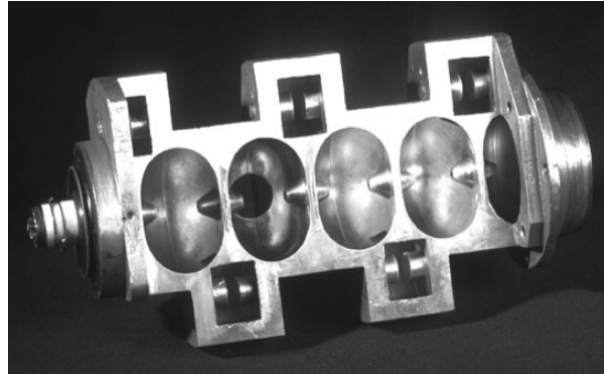
Fonte: Podgorsak, E. B. *Radiation Oncology Physics: A Handbook for Teachers and Students* [7].

alta potência necessárias para o processo. Essas ondas eletromagnéticas de alta frequência são injetadas na guia de ondas simultaneamente ao feixe de elétrons, fornecendo a energia que será transferida para a aceleração das partículas.

A guia de ondas é uma estrutura metálica cilíndrica, mantida a vácuo, essencial para a transmissão de micro-ondas e aceleração de elétrons. Em seu interior, o tubo é subdividido por discos com orifícios centrais (íris) que formam uma série de cavidades conectadas. O papel fundamental dessas cavidades é distribuir a potência de radiofrequência gerada pela fonte e estabelecer um padrão de campo elétrico ideal para transferir energia aos elétrons em movimento. O design dessa aceleração pode ser baseado em uma estrutura de ondas viajantes, onde as micro-ondas fluem continuamente de uma ponta à outra do tubo, ou em uma configuração de ondas estacionárias. Neste último caso, a reflexão das micro-ondas nas extremidades cria um padrão que permite que metade das cavidades (as de acoplamento) seja deslocada para a lateral, o que reduz o comprimento total da guia aceleradora em impressionantes 50%. Uma vista em corte de um guia de ondas acelerador de ondas estacionárias de 6 MV é mostrada na figura 2.2 [7].

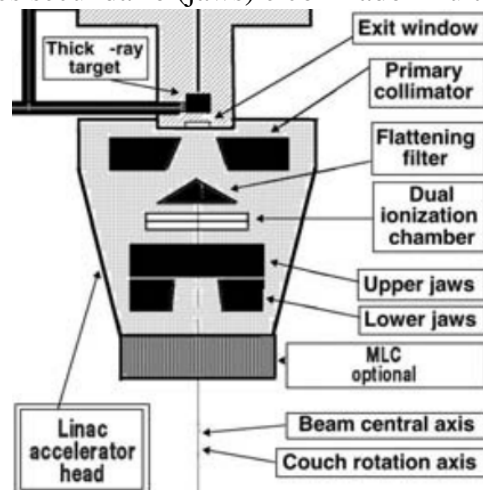
Por fim, o cabeçote recebe o feixe de elétrons de alta energia proveniente da guia de ondas e atua na conformação, monitoramento e direcionamento da radiação terapêutica. Quando o linac opera no modo de tratamento com fótons, esses elétrons colidem contra um alvo metálico de alto número atômico (geralmente tungstênio), convertendo sua energia cinética em raios X através do processo de radiação de freamento (bremsstrahlung). Após essa etapa, o feixe passa por um sistema de modificação e segurança rigoroso embutido no cabeçote: um filtro aplanador entra em ação para homogeneizar a intensidade dos fótons, enquanto câmaras de ionização monitoram a dose de radiação em tempo real. O estágio final ocorre no sistema de colimação, com destaque para o colimador multilâminas (MLC), que bloqueia a radiação indesejada e molda o feixe final com precisão milimétrica para se adequar perfeitamente ao formato tridimensional do tumor no paciente [7].

Figura 2.2: Vista em corte de um guia de ondas acelerador de ondas estacionárias de 6 MV. Como essas cavidades intermediárias não possuem campo elétrico, elas não geram ganho de energia para os elétrons, permitindo que as cavidades aceleradoras principais fiquem encostadas umas nas outras, reduzindo em 50% o comprimento de uma guia de ondas [7].



Fonte: Podgorsak, E. B. *Radiation Oncology Physics: A Handbook for Teachers and Students* [7].

Figura 2.3: Vista em corte do cabeçote de tratamento de um linac, destacando a trajetória do feixe ao longo do eixo central através do alvo, colimador primário, filtro aplanador, câmara de ionização dupla, colimadores secundário (jaws) e colimador multilâminas (MLC) [7].



Fonte: Podgorsak, E. B. *Radiation Oncology Physics: A Handbook for Teachers and Students* [7].

3 EFEITOS DA RADIAÇÃO IONIZANTE NA MATÉRIA

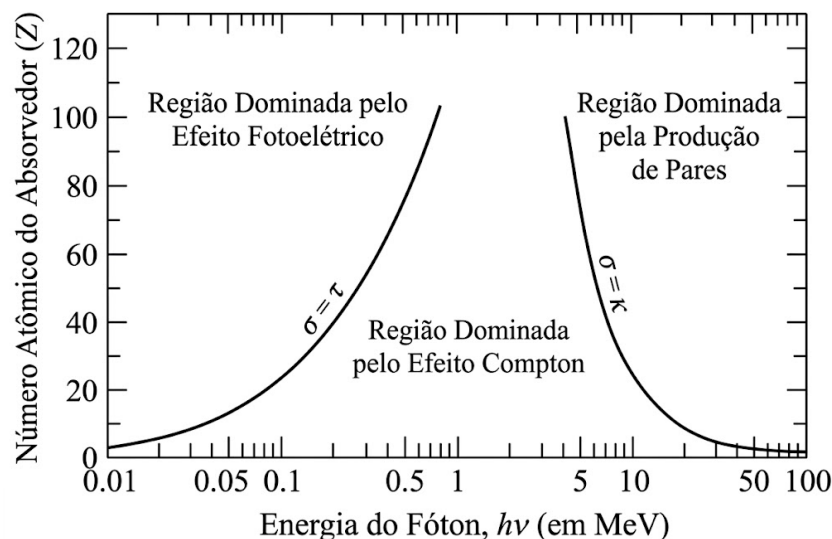
O principal efeito da radiação ao interagir com a matéria é a sua capacidade de transferir energia para o meio, resultando em processos de excitação e ionização atômica. Quando a radiação incidente possui energia suficiente para ejetar um elétron de sua órbita, ocorre a chamada ionização primária, gerando um elétron livre. Caso esse elétron ejetado adquira energia cinética remanescente considerável, ele passará a interagir com os átomos vizinhos, provocando novas ejeções em cascata através de ionizações secundárias. No escopo da física de ALs usados clinicamente, a interação dos fótons e elétrons com a matéria é governada por quatro mecanismos fundamentais, cuja predominância depende diretamente da energia da radiação e do número atômico Z do material absorvedor [8, 6].

Em energias mais baixas, predomina o efeito fotoelétrico, um processo de absorção total no qual o fóton incidente colide com um elétron de uma camada interna do átomo (geralmente a camada K). O fóton transfere toda a sua energia para o elétron, desaparecendo no processo. O elétron é então ejetado como um fotoelétron, deixando o átomo ionizado e instável. À medida que a energia do fóton aumenta para faixas terapêuticas (MeV), o mecanismo dominante passa a ser o espalhamento Compton. Diferente do fotoelétrico, o efeito Compton envolve uma absorção parcial: o fóton de alta energia colide com um elétron fracamente ligado das camadas mais externas, ejetando-o (elétron Compton) e desviando-se com uma energia menor e uma nova direção [8, 6].

Para fótons de energias mais elevadas (acima do limiar de 1,022 MeV), passa a ocorrer também a produção ou aniquilação de pares. Nesse fenômeno, o fóton interage diretamente com o intenso campo coulombiano do núcleo atômico, convertendo integralmente sua energia em matéria e dando origem a um par partícula-antipartícula: um elétron e um pósitron. Ao final de sua trajetória, quando o pósitron perde energia e repousa, ele se combina com um elétron livre do meio no processo inverso, conhecido como aniquilação, convertendo a massa de ambos em dois fótons de 0,511 MeV emitidos em direções opostas.

Por fim, podemos voltar à etapa de produção do feixe de fótons no AL e analisar o comportamento dos elétrons acelerados colidindo contra materiais de alto Z (como o alvo do cabeçote do AL) produzindo radiação de freamento ou bremsstrahlung. Esse fenômeno ocorre quando o elétron passa próximo ao núcleo e sofre uma desaceleração abrupta devido à força atrativa; a energia cinética perdida pelo elétron nessa frenagem é instantaneamente emitida na forma de um fóton de raios X [8, 6].

Figura 3.1: Regiões de dominância dos três principais mecanismos de interação dos fótons com a matéria (efeito fotoelétrico, espalhamento Compton e produção de pares) em função da energia do fóton incidente e do número atômico Z do material absorvedor. As curvas contínuas representam as fronteiras onde as seções de choque dos efeitos adjacentes são iguais [8].

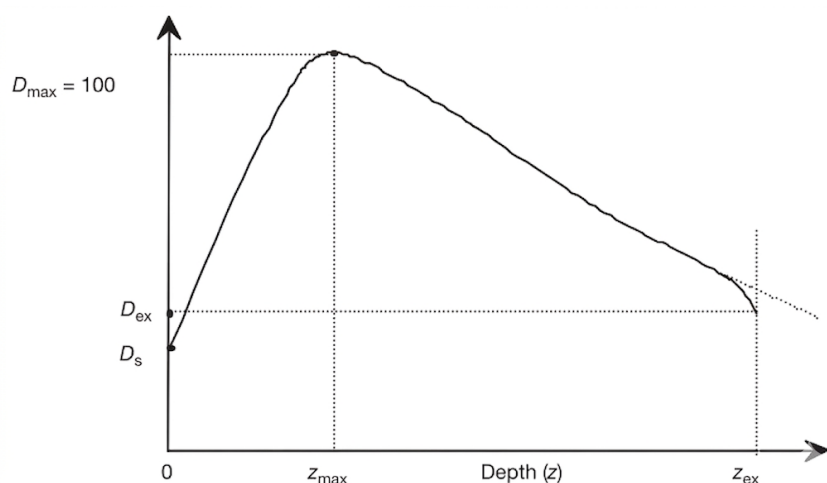


Fonte: Attix, F. H. *Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry* [8].

O processo pelo qual a radiação transfere sua energia para o meio resultante das ionizações depende diretamente da forma como essa energia é espacialmente depositada ao longo da trajetória da partícula. Essa característica é quantificada pela Transferência Linear de Energia (LET, Linear Energy Transfer), que mede a quantidade de energia que uma partícula carregada transfere para o meio por unidade de comprimento percorrido [8].

Os elétrons e os fótons gerados em ALs clínicos são classificados como radiações de baixo LET. Por serem partículas muito leves (no caso dos elétrons) ou radiação eletromagnética sem carga (no caso dos fótons), eles atravessam a matéria e depositam sua energia de forma esparsa e distribuída ao longo da trajetória. Na física, essa deposição macroscópica de energia por unidade de massa é definida como dose absorvida, medida em gray (Gy) [8].

Figura 3.2: Curva típica de porcentagem de dose em profundidade (PDD) para um feixe de fótons de megavoltagem em função da profundidade z . O gráfico destaca a dose na superfície D_s , a região de *build-up* (acúmulo de dose) até atingir a dose máxima $D_{max} = 100\%$ na profundidade z_{mx} [7].



Fonte: Podgorsak, E. B. *Radiation Oncology Physics: A Handbook for Teachers and Students* [7].

4 EFEITOS BIOLÓGICOS

Os efeitos biológicos da radiação ionizante na matéria viva iniciam-se a nível molecular, tendo como alvo principal o ácido desoxirribonucleico (DNA). A deposição de energia pode ocorrer por ação direta, quando a radiação ioniza diretamente os átomos da fita de DNA, ou por ação indireta, na qual a radiação interage com as moléculas de água celulares (radiólise da água), gerando radicais livres altamente reativos que atacam a estrutura genética. Essas interações provocam quebras simples ou duplas na fita do DNA e alterações na sequência de suas bases nitrogenadas. Se os mecanismos de reparo celular falharem, essas lesões evoluem para mutações estáveis ou para a morte celular [9].

A radiação em forma de fótons de altas energias, por ser eletromagnética e altamente penetrante, atravessa tecidos profundos, interagindo com o DNA de múltiplas células ao longo

do seu trajeto. Quando essas radiações danificam o maquinário de regulação celular sem destruí-lo de imediato, há perda de função de organelas vitais ou a proliferação descontrolada de células mutadas, culminando no desenvolvimento de tumores [9].

Os efeitos biológicos da radiação são classificados em duas categorias; a primeira envolve os efeitos estocásticos. Estes são fenômenos de natureza probabilística, onde qualquer exposição, por menor que seja a dose, carrega um risco potencial de induzir danos genéticos. Não existe um limiar de dose seguro abaixo do qual a probabilidade de ocorrência seja nula, embora a chance de manifestação aumente linearmente com a dose acumulada. A mutação germinativa e a carcinogênese são as consequências estocásticas mais relevantes a longo prazo, decorrentes sobretudo da dose acumulada de radiação recebida [9].

A segunda envolve os efeitos determinísticos, que são explorados intencionalmente na radioterapia, estritamente controlada, com o objetivo de eliminar a massa tumoral. Para erradicar o tumor, é planejada a entrega de uma dose de radiação que deliberadamente ultrapasse o limiar de tolerância biológica daquelas células cancerígenas. Sabendo que a gravidade do dano celular aumenta proporcionalmente à dose acima desse limite, o feixe do AL é configurado para induzir uma taxa de quebras letais no DNA que supere completamente a capacidade de reparo do tumor. Assim é direcionada a morte de um número crítico de células malignas por mitose mitigada ou apoptose, inviabilizando a sustentação e a replicação do tecido tumoral até o seu colapso total [9].

O grande desafio clínico reside em concentrar a dose destrutiva e letal no volume do tumor, onde o efeito determinístico é desejado, enquanto se fraciona a aplicação para permitir que os órgãos de risco vizinhos operem abaixo de seus respectivos limiares de tolerância, garantindo a preservação dos órgãos em risco.

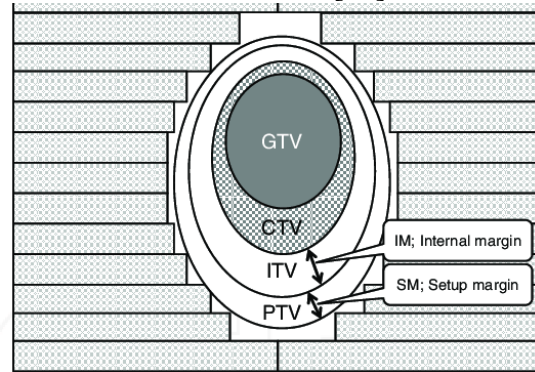
5 RADIOTERAPIA GUIADA POR IMAGEM

Radioterapia guiada por imagem (IGRT) consiste na aquisição e uso frequente de imagens (de projeção ou volumétricas) na própria sala de tratamento, imediatamente antes ou durante a entrega da radiação, com o objetivo de verificar e corrigir o alinhamento do volume-alvo planejado (PTV) com o volume tratado no dia[10].

O planejamento radioterápico baseia-se em definir o GTV (*Gross Tumor Volume*), que é a doença macroscópica visível, e o CTV (*Clinical Target Volume*), que inclui o GTV e possíveis áreas de extensão microscópica da doença não visíveis nas imagens. Para compensar as variações fisiológicas internas de tamanho, forma e posição do CTV durante o tratamento, adiciona-se ao CTV uma margem interna (*Internal Margin* - IM). O volume resultante dessa expansão é o ITV (*Internal Target Volume*), que representa a região que efetivamente engloba o CTV em todos os seus movimentos fisiológicos previsíveis em relação à anatomia do paciente. Por fim, sobre o ITV, adiciona-se uma margem de posicionamento (*Set-up Margin*) para criar o PTV (*Planning Target Volume*). O PTV não é um volume biológico, mas sim um volume geo-

métrico projetado para garantir que o CTV receba a dose prescrita, compensando tanto os erros externos de posicionamento diário do paciente quanto as movimentações internas dos órgãos [11].

Figura 5.1: Ilustração esquemática dos volumes da radioterapia, definidos pela *International Commission on Radiation Units and Measurements* [11].



Fonte: Ichiji, K. et. al. *Frontiers in Radiation Oncology* [12].

A verificação posicional é realizada por meio de sistemas de imagem integrados aos ALs. Exemplos encontrados em clínicas são os portais eletrônicos (EPID - *Electronic Portal Imaging Device*), as imagens de tomografia computadorizada de feixe cônico (CBCT - *Cone Beam Computed Tomography*) ou imagens de ressonância magnética (IRM) [13].

Imageamento com EPID utiliza o próprio feixe de tratamento para gerar imagens de projeção radiográfica. Como os fótons de MV interagem com a matéria predominantemente pelo espalhamento Compton, o contraste de tecidos moles na imagem MV é muito baixo. Por isso, o EPID é utilizado principalmente para o alinhamento baseado em anatomia óssea ou na localização de marcadores metálicos.

Figura 5.2: Acelerador linear Elekta Versa com o sistema de Imagem Portal Eletrônica em evidência.



Foto: Divulgação/Elekta.

CBCT é a integração de um tubo de raios X de quilovoltagem no linac, sendo ortogonal ao feixe de tratamento. Nestas máquinas, o tubo e o painel detector giram ao redor do paciente, reconstruindo uma imagem volumétrica no momento do tratamento. Por utilizar fótons de

kilovoltagem, onde o efeito fotoelétrico é dominante, o CBCT oferece um excelente contraste de tecidos moles. Isso possibilita o alinhamento diário baseado na anatomia real dos órgãos, sendo hoje o padrão-ouro para IGRT.

Figura 5.3: Acelerador linear Halcyon Siemens Healthineers. Em sua construção há um kVTC para imageamento do paciente.

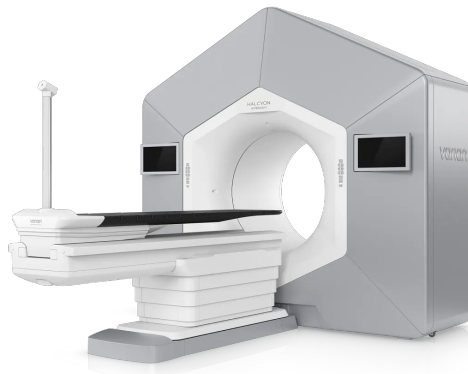


Foto: Divulgação/Siemens Healthineers.

Equipamentos de MR-Linac acoplam um scanner de Ressonância Magnética (RM) ao AL. A principal vantagem é a obtenção de imagens com resolução e contraste de tecidos moles incomparáveis com os raios X, sem depositar dose de radiação ionizante adicional no paciente para a formação da imagem. Além disso, a RM permite o imageamento contínuo durante a irradiação, promovendo o rastreamento dinâmico de tumores que se movem com a respiração.

Figura 5.4: A estação de tratamento Unity Elekta é composta por um acelerador linear e um scanner de RM.



Foto: Divulgação/Elekta.

Apesar da IGRT garantir que o volume alvo do tratamento do paciente seja posicionado com precisão, suas correções baseiam-se em translações e rotações da mesa de tratamento. O sistema IGRT assume a premissa de que a anatomia interna do paciente permaneceu inalterada desde o dia do planejamento original [3].

Na prática, ao longo de várias semanas no tratamento, o paciente pode perder muito peso, o tumor pode sofrer regressão, ou órgãos internos podem deformar-se. Com alterações

morfológicas severas, aplicar um deslocamento rígido da mesa torna-se insuficiente, pois o planejamento dosimétrico já não corresponde à anatomia atual. A IGRT carece de habilidade para recalcular ou alterar o plano de tratamento [3].

6 RADIOTERAPIA ADAPTATIVA

A Radioterapia adaptativa surge como a evolução natural e o refinamento da IGRT, atuando diretamente na modificação do plano de tratamento original para acomodar alterações anatômicas, morfológicas ou biológicas que o paciente sofre ao longo do tratamento.

O corpo do paciente é um sistema dinâmico. Exemplos que exigem adaptação incluem: a perda de peso significativa do paciente, o que altera a profundidade de penetração do feixe e a deposição de dose; a regressão volumétrica do tumor em resposta à dose de radiação; ou variações persistentes e deformações no preenchimento de órgãos internos, como reto, bexiga e estômago. Sem a adaptação, o plano original poderia entregar doses a tecidos saudáveis que se moveram para a região de alta dose ou subdosar o tumor [3].

O fluxo de trabalho na radioterapia adaptativa tradicional baseia-se na retroalimentação de imagens repetidas. Inicialmente, a imagem do dia é adquirida. Ao constatar uma mudança anatômica que comprometa a dosimetria, a equipe médica realiza a ressegmentação dos contornos anatômicos do tumor e dos órgãos adjacentes de risco. Em seguida, a equipe de física médica refaz o cálculo da dose para avaliar o impacto dessas mudanças e gerar um plano de tratamento otimizado. Esse processo pode ser realizado de forma offline (entre as sessões de tratamento) ou online (com o paciente aguardando na mesa de tratamento, utilizando softwares de planejamento) [3].

Apesar de a radioterapia adaptativa oferecer adaptação à anatomia do paciente ao longo do tratamento, baseada principalmente em informações morfológicas, ela possui uma limitação intrínseca. Reage às mudanças físicas de tamanho e forma ao longo dos dias, mas não possui a capacidade de rastrear a atividade biológica do tumor durante a entrega do feixe. É exatamente diante dessa barreira tecnológica que a radioterapia biologicamente guiada (BgRT) se apresenta como a nova fronteira clínica. Ao integrar um sistema PET ao LINAC, a BgRT deixa de depender unicamente da morfologia por raios X e passa a utilizar a emissão contínua de pósitrons oriunda do metabolismo do próprio tumor para rastreá-lo e disparar o feixe de radiação simultaneamente, unindo biologia, imagem e tratamento no mesmo instante [14]

O objetivo deste estudo é analisar os fundamentos e a implementação da radioterapia biologicamente guiada. Para isso, o trabalho propõe-se a descrever os princípios de formação da imagem de PET, examinar as características tecnológicas do equipamento clínico SCINTIX X1 e discutir as aplicações clínicas e perspectivas deste método no tratamento oncológico.

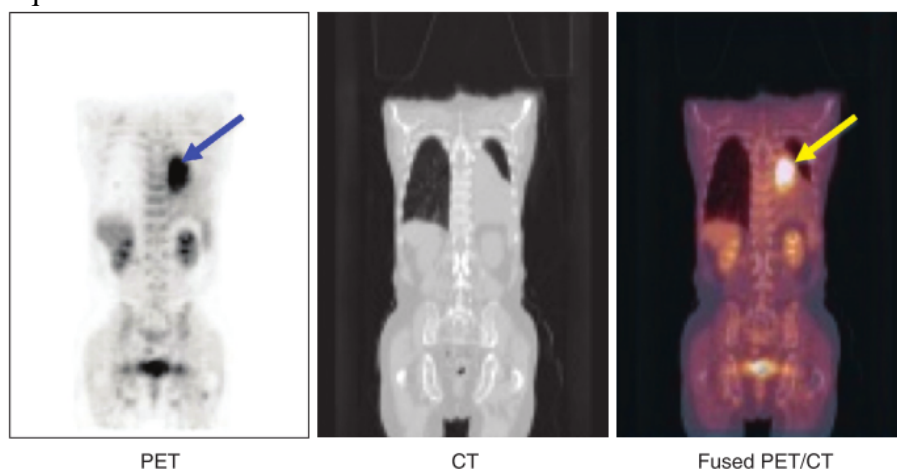
Radioterapia biologicamente guiada

7 RADIOTERAPIA BIOLOGICAMENTE GUIADA

A radioterapia biologicamente guiada é uma modalidade inovadora que utiliza sinal de emissão de pósitrons detectados por PET durante a entrega do tratamento. Diferente das técnicas convencionais de radioterapia guiada por imagem, que dependem majoritariamente de coordenadas espaciais pré-definidas e imagens anatômicas estáticas capturadas antes do início da sessão, a BgRT estabelece um ciclo de feedback direto entre a biologia tumoral e o acelerador linear. Essa abordagem permite que o próprio tumor radiomarcado atue como seu referencial biológico, ou "farol", integrando a imagem funcional e molecular diretamente no processo contínuo de entrega do tratamento [15].

O fluxo de trabalho inicial envolve a simulação estrutural anatômica por TC, frequentemente utilizando aquisições em quatro dimensões (4D-TC), e uma sessão de modelagem funcional PET com a administração sistêmica de um radiofármaco, tipicamente a fluordesoxiglicose (FDG) contendo o isótopo Flúor-18. A partir desses dados, define-se uma fronteira virtual exclusiva desta técnica, chamada de Zona de Rastreamento Biológico (BTZ), que atua como um filtro espacial de escuta ativa para a máquina. O delineamento estrutural da BTZ, bem como as métricas de validação do sinal metabólico necessárias para o sistema, serão discutidos em detalhes na seção de Planejamento do Tratamento [14, 15, 16].

Figura 7.1: Imagem de corpo inteiro de um paciente submetido a exame de PET/CT. **PET:** Imagem em escala de cinza, com indicação de acúmulo de sinal PET devido a alta irrigação sanguínea na região tumoral. **CT:** Imagem adquirida por kVTC de 140 kV. **Fusão PET/CT:** Imagem de fusão das duas modalidades de exame, com indicação da região tumoral localizada no pulmão esquerdo.



Fonte: Cherry, S. R. et. al. *Physics in Nuclear Medicine* [17].

Do ponto de vista físico e tecnológico, o mecanismo de rastreamento contínuo entra em ação a partir da instabilidade do Flúor-18, que desencadeia o decaimento beta positivo. A

emissão de pósitrons no ambiente intracelular da lesão resulta em colisões com elétrons do tecido, gerando pares de fótons de aniquilação de 511 keV ejetados em direções antiparalelas. Detectores de cintilação identificam a coincidência desses fótons em frações de nanossegundos, traçando uma Linha de Resposta (LOR). A densa nuvem de eventos é então processada para triangular rigorosamente a origem da emissão, maximizando a precisão pela fusão contínua da imagem metabólica com o mapa de densidade eletrônica estrutural gerado pela tomografia de quilovoltagem (kVTC) acoplada ao equipamento [14, 16].

Esse aparato tecnológico permite que o sistema direcione os feixes de radiação de volta para a lesão com uma latência na escala temporal curta, permitindo ajustes dinâmicos do feixe com base no sinal biológico reconstruído. Consequentemente, a máquina recalcula a angulação das lâminas do colimador (MLC) de forma síncrona com a aquisição dos dados biológicos. Se o tumor se move em decorrência da respiração, a emissão de pósitrons acompanha esse deslocamento, garantindo que a dose seja entregue exatamente onde o sinal metabólico se encontra ativo e reduzindo as incertezas geométricas de posicionamento presentes nos tratamentos tradicionais [15, 16].

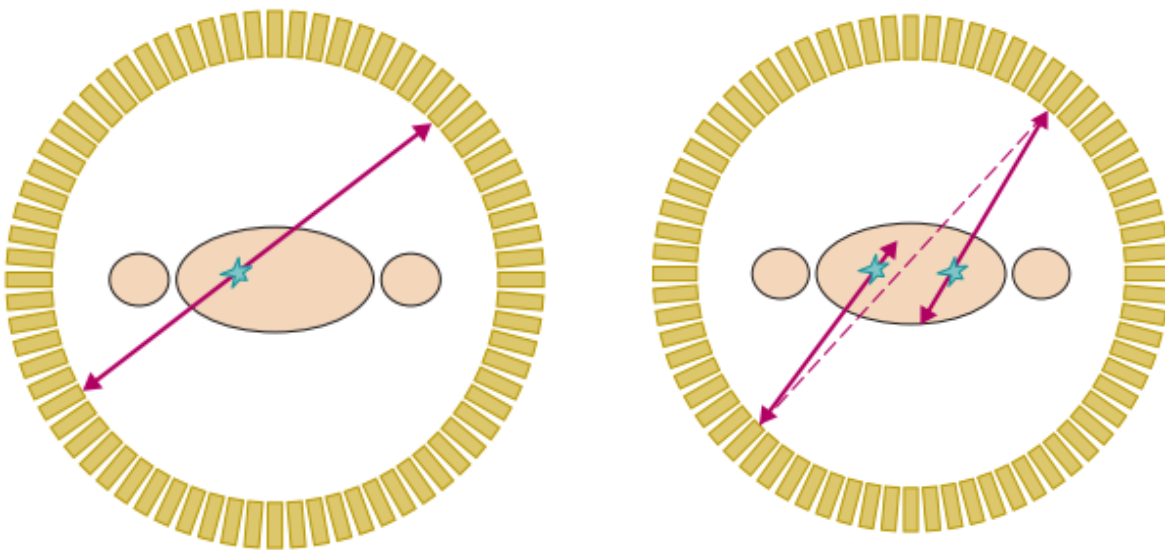


Figura 7.2: Imagens de PET são baseadas na coincidência de detecção do fóton gama emitido no paciente. Podendo haver variações da localização por desvios estatísticos da ocorrência da aniquilação do pósitron. Esquerda, representação de coincidência verdadeira; Direita, representação de coincidência aleatória.

Fonte: Cherry, S. R. *et. al. Physics in Nuclear Medicine* [17].

Uma das principais vantagens clínicas desta tecnologia é o seu gerenciamento de movimento baseado em sinal biológico, que reduz substancialmente a necessidade de sensores externos, marcadores implantados ou técnicas complexas de controle respiratório. Com o rastreamento em tempo real, a equipe médica pode utilizar margens de guia biológica (BgM) consideravelmente mais estreitas que os amplos volumes de movimento tradicionais (ITV). Isso resulta em uma redução significativa nos volumes de irradiação, protegendo os tecidos saudáveis. Em adição, a administração sistêmica do traçador viabiliza o tratamento eficiente de múltiplos

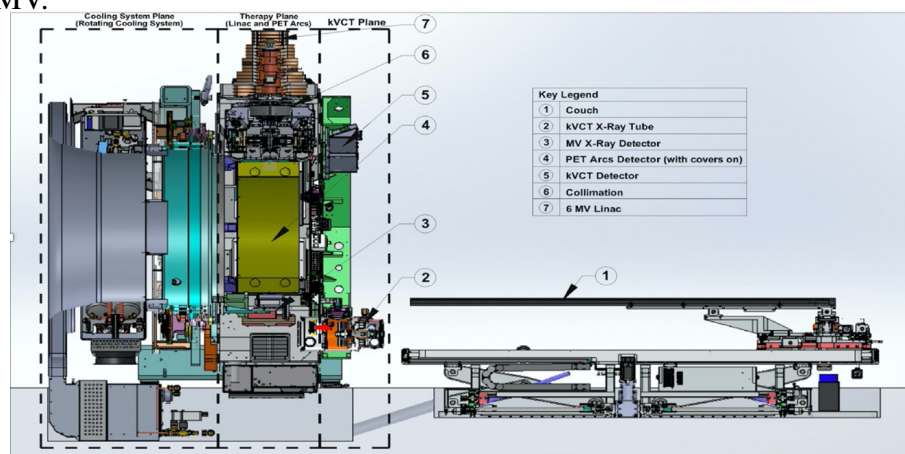
tiplos alvos metastáticos simultaneamente em uma única sessão, sempre sob o monitoramento rigoroso dos parâmetros de segurança do sistema [14, 15].

8 REFLEXION X1

Atualmente, o RefleXion X1, com a tecnologia SCINTIX®, é o primeiro e, até o momento, o único sistema PET-LINAC comercial desenvolvido para BgRT. Trata-se de uma plataforma híbrida inovadora que marca a convergência entre diagnóstico funcional biológico e a terapia oncológica [15]. Ao contrário dos aceleradores lineares convencionais, esta máquina integra, em um único gantry circular de rotação rápida, um sistema de destecção PET de alta sensibilidade e um acelerador linear de 6 MV [16]. Essa arquitetura permite que o sistema capture informações biológicas e funcionais do paciente durante a entrega da radiação, permitindo a reconstrução dinâmica do sinal PET utilizado para orientar o tratamento [16].

O equipamento utiliza uma estrutura de gantry em anel deslizante (*slip-ring*) com um diâmetro de abertura de 85 cm, capaz de realizar uma rotação contínua a 60 RPM. Diferente dos sistemas convencionais, ele integra dois planos axiais paralelos: o plano anterior é dedicado à imagem por kVTC de feixe em leque (*fan-beam*) e o plano central abriga o sistema terapêutico integrado aos detectores PET utilizados para o rastreamento biológico, mantendo uma separação de 38,6 cm entre os planos. Essa configuração permite que a localização anatômica e a entrega da dose ocorram de forma coordenada [16].

Figura 8.1: Corte sagital do Scintix [16]. O equipamento é dividido em 3 seções: Anterior compõe o sistema de kVTC; Central o sistema de tratamento e imageamento com PET; Posterior o sistema de refrigeração. 1) Mesa de posicionamento do paciente. 2) Tubo de raio-X de quilovoltagem para tomografia computadorizada. 3) Detector de megavoltagem. 4) Arcos detectores de PET. 5) Detector de quilovoltagem. 6) Colimadores do feixe de irradiação. 7) Linac de 6MV.



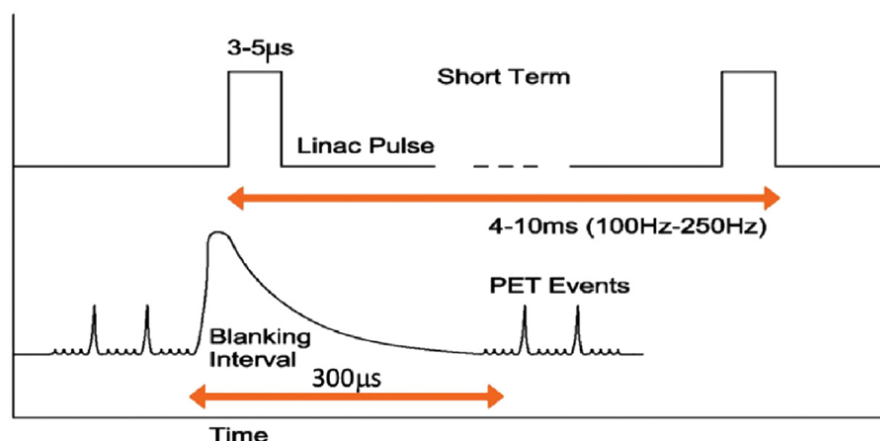
Fonte: Oderinde, O. et. al. *Current status and future directions of adaptive radiotherapy* [16].

O sistema é equipado com um acelerador linear compacto que produz um feixe de fótons de 6 MV sem filtro de achatamento (FFF), operando com uma taxa de dose nominal entre

850 e 1000 cGy/min. O diferencial técnico para a terapia biologicamente guiada reside no seu sistema de colimação: um MLC binário de 64 folhas de tungstênio, acionado por um mecanismo pneumático que permite transições entre os estados aberto e fechado em apenas 7 a 10 milissegundos. Essa velocidade é crucial para reduzir a latência total do sistema para 350-400 ms, garantindo que a radiação seja disparada sincronamente à posição real detectada do tumor em movimento [14].

A detecção biológica é realizada por dois arcos detectores PET de 90° posicionados ortogonalmente ao cabeçote do linac. Estes detectores utilizam cristais cintiladores acoplados a fotomultiplicadores, capazes de reconstruir imagens 3D a cada 100 milissegundos. Para proteger a integridade dos dados durante a terapia, o sistema implementa um intervalo de bloqueio (*blanking*) de 300 μ s imediatamente após cada pulso do linac; isso evita que a radiação espalhada pelo feixe de tratamento gere eventos de coincidência falsos nos detectores PET [16].

Figura 8.2: A irradiação do linac produz fótons de alta energia, que são captados pelo cintilador. Um intervalo de leitura PET e irradiação é feito para não ocorrer falsa detecção do sinal emitido no tumor.



Fonte: Oderinde, O. et. al. *Current status and future directions of adaptive radiotherapy* [16].

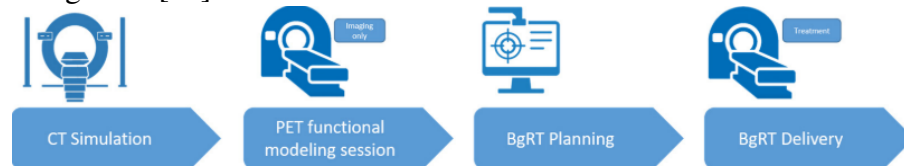
Para o alinhamento anatômico, o sistema dispõe de um kVTC de 16 fatias que opera de forma helicoidal, permitindo a fusão precisa entre as imagens diagnósticas e a anatomia no dia do tratamento. O suporte ao paciente é feito por uma mesa robótica com seis graus de liberdade (incluindo correções de inclinação e guinada), que se move em incrementos discretos de 2,1 mm, conhecidos como "estações de feixe". Essa técnica de movimento por estações, em oposição ao movimento contínuo de outros sistemas, permite elevada flexibilidade na modulação longitudinal do feixe [16].

9 PLANEJAMENTO DO TRATAMENTO

Para que a BgRT seja executada com segurança e precisão, é necessário um fluxo de trabalho estruturado e rigoroso. Diferente da radioterapia convencional, que se baseia quase

exclusivamente em imagens anatômicas estáticas, a BgRT exige a incorporação de dados metabólicos para guiar a máquina. Segundo Cai et al., o fluxo de trabalho da BgRT na plataforma RefleXion X1 é dividido em quatro etapas principais: Simulação por Tomografia Computadorizada (CT Sim), Sessão de Modelagem Funcional PET, Planejamento da BgRT e, por fim, a Entrega do Tratamento [14].

Figura 9.1: Fluxo de trabalho do planejamento e entrega da dose na modalidade de radioterapia biologicamente guiada [14].



Fonte: Cai, B. et. al. *Strategies for Offline Adaptive Biology-Guided Radiotherapy (BgRT) on a PET-Linac Platform* [14].

A primeira etapa, CT Sim, segue os princípios da radioterapia moderna. O paciente é posicionado com imobilizadores e realiza-se uma tomografia, frequentemente do tipo 4D (que captura o ciclo respiratório), para mapear a anatomia e a movimentação dos órgãos. A partir dessas imagens, a equipe médica delinea o Volume Tumoral Macroscópico (GTV), o Volume Alvo de Planejamento (PTV) e os Órgãos em Risco (OARs) adjacentes. No entanto, a BgRT introduz a necessidade de contornar uma estrutura virtual exclusiva desta modalidade: a Zona de Rastreamento Biológico (BTZ, do inglês Biology Tracking Zone). A BTZ é um volume conceitual criado a partir da expansão do volume de movimento do tumor. A sua função é atuar como uma "janela" ou filtro para o sistema: a máquina de tratamento apenas considerará as emissões de PET (as linhas de resposta geradas pela aniquilação de pósitrons) que se originarem estritamente de dentro da BTZ, mascarando e ignorando qualquer atividade metabólica ou ruído de fundo proveniente de outras partes do corpo.

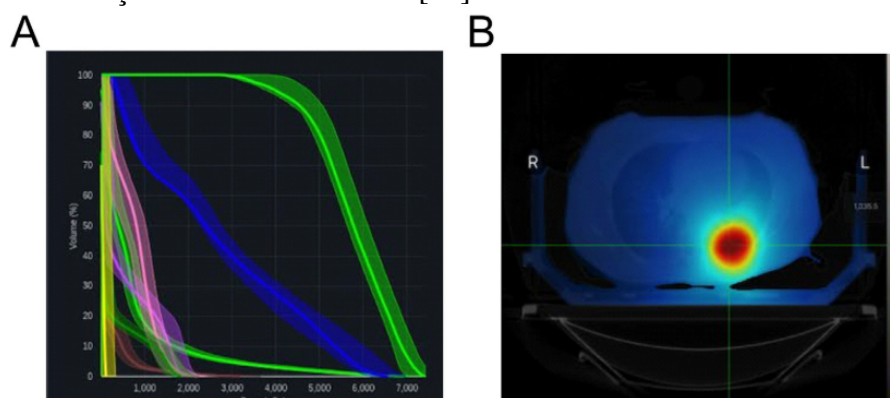
A segunda etapa é a Sessão de Modelagem Funcional PET. Nesta fase, o paciente recebe uma injeção do radiotraçador (tipicamente 15 mCi de FDG) e, após o tempo de captação, é posicionado na própria máquina. Uma imagem de kVTC é adquirida para localização e, em seguida, o sistema realiza uma aquisição de imagens PET. É fundamental ressaltar que, nesta etapa, nenhuma dose de radiação terapêutica é entregue; o objetivo é puramente "ensinar" ao sistema como o tumor do paciente emite os sinais biológicos no ambiente exato onde o tratamento ocorrerá. As imagens PET adquiridas são então fundidas com a tomografia de simulação para confirmar a localização do alvo.

A terceira etapa, o Planejamento da BgRT, é onde a física médica entra em ação. A distribuição final da dose de radiação será orientada não apenas pelas restrições anatômicas clássicas, mas também pelos dados da Modelagem Funcional PET. Para garantir que o sinal biológico seja forte e estável o suficiente para guiar os feixes de radiação em tempo real, o software de planejamento do sistema (TPS) calcula duas métricas cruciais baseadas exclusivamente na imagem PET [14]:

1. Concentração de Atividade (AC - *Activity Concentration*): Indica a força absoluta do sinal disponível para guiar os feixes. É calculada pela diferença entre a média de captação dos 20% dos voxels mais "quentes"(com maior sinal PET) dentro da BTZ e a média dos voxels de uma casca de 3 mm imediatamente fora da BTZ. Para que o planejamento prossiga, a AC deve ser estritamente superior a 5 kBq/mL.
2. Sinal do Alvo Normalizado (NTS - *Normalized Target Signal*): Mede o contraste do sinal do tumor em relação ao ruído de fundo imediato. É a razão entre a Concentração de Atividade (AC) e o desvio padrão dos voxels da casca de 3 mm fora da BTZ. O planejamento só é validado se o NTS for superior a 2.7.

Se esses parâmetros de qualidade do sinal forem atingidos, o software gera o plano. Uma inovação particular do TPS da RefleXion é a criação do Histograma de Dose-Volume Limitado (bDVH - *bounded Dose-Volume Histogram*). Sabendo que a biologia do tumor é dinâmica e pode mudar de um dia para o outro, o bDVH simula o plano de tratamento sob diversas condições de incerteza. Ele calcula como a dose se comportaria se a captação de FDG variasse em até $\pm 25\%$, se o paciente se movesse até 5 mm em qualquer direção e se houvesse 3% de incerteza na entrega da dose. Isso gera um gráfico com "bandas de confiança"(um melhor e um pior cenário), garantindo ao médico que, independentemente de pequenas variações biológicas diárias, os órgãos de risco estarão protegidos e o tumor receberá a dose letal [14].

Figura 9.2: A) Histograma de Dose-Volume Limitado simulado pelo sistema X1. B) Distribuição de dose de radiação emulado no tumor. [15].



Fonte: Vitzthum, L. K. *et. al. The Future of Radiotherapy: Emerging Technologies and Novel Paradigms* [15].

A última etapa é a Entrega da BgRT. No dia de cada fração de tratamento, o paciente recebe uma nova injeção de FDG. Após ser posicionado na máquina, o sistema realiza um escaneamento rápido (o Pre-scan PET). O objetivo do pre-scan é recalcular a AC e o NTS para o dia específico e prever a dose que será entregue. O tratamento só é liberado se a máquina confirmar que a AC continua > 5 kBq/mL, o NTS > 2.0 , e que 95% da dose prevista se encaixa perfeitamente dentro dos limites seguros do bDVH aprovado no planejamento. Se o tumor tiver encolhido drasticamente ou perdido captação (indicando necrose ou resposta rápida ao

tratamento), o sistema interrompe a sessão de forma autônoma por segurança, demandando que a equipe médica adote estratégias de adaptação offline do plano [14].

10 ESTUDO CLÍNICO

A validação clínica da radioterapia guiada por emissão de pósitrons em humanos foi estabelecida pelo ensaio BIOGUIDE-X [15]. Conduzido como um estudo de braço único, aberto e sequencial, a investigação teve como objetivo principal comprovar a segurança, a precisão dosimétrica e a exequibilidade física da modalidade.

O estudo recrutou pacientes com mais de 21 anos que apresentavam tumores primários ou metastáticos com alta avidéz por FDG (definida por um $SUV_{max} \geq 6$ no PET diagnóstico). As lesões alvo precisavam ter dimensões entre 2 e 5 cm e estar localizadas no pulmão ou no tecido ósseo. A escolha anatômica foi estratégica para o teste da máquina: tumores pulmonares testariam a capacidade do sistema de lidar com o intenso movimento respiratório, enquanto os tumores ósseos testariam a sensibilidade do sistema em cenários onde o contraste do sinal PET é inerentemente menor (uma vez que o tecido ósseo e muscular de fundo possui maior captação basal de FDG do que o parênquima pulmonar cheio de ar). O ensaio foi dividido em duas coortes.

COORTE I: DETERMINAÇÃO DA DOSE DE RADIOTRAÇADOR

A primeira fase do estudo buscou identificar a dose mínima segura e eficaz de ^{18}F -FDG necessária para gerar um sinal com qualidade suficiente (NTS e AC) para o funcionamento da plataforma X1. Utilizando um modelo estatístico modificado do tipo "3 + 3", o estudo testou uma dose injetável inicial de 15 mCi de FDG. Os resultados foram categóricos: 100% dos pacientes avaliáveis (6 de 6) que receberam a injeção de 15 mCi atingiram uma Concentração de Atividade (AC) excelente (mediana de 12.94 kBq/mL), muito superior ao limite mínimo de 5.0 kBq/mL exigido pela máquina. Com isso, concluiu-se que 15 mCi é a dose padrão recomendada, não havendo necessidade de submeter os pacientes a doses maiores de radiação sistêmica para melhorar o rastreamento.

COORTE II: A PROVA DA "ENTREGA EMULADA"

Abordou o maior desafio científico: provar que a dose de radiação calculada dinamicamente pelo sinal PET em tempo real corresponderia exatamente ao que o médico planejou. Para garantir a segurança dos pacientes, os pesquisadores utilizaram uma metodologia inovadora chamada "Entrega Emulada" (Emulated Delivery). Foram inscritos 9 pacientes que já realizariam radioterapia ablativa estereotáxica (SBRT) convencional como padrão de cuidado. Durante a primeira e a última fração de seus tratamentos, esses pacientes foram levados à má-

quina RefleXion X1, injetados com FDG, e a máquina coletou os sinais PET em tempo real. No entanto, em vez de disparar a radiação real no paciente, a máquina gerou as instruções de disparo dos feixes (os movimentos do colimador multilâminas e a fluência do acelerador) e aplicou essas instruções in silico (no computador) sobre a anatomia da tomografia do paciente. Isso gerou um Histograma Dose-Volume (DVH) "entregue virtualmente", que pôde ser comparado com o plano médico aprovado para ver se haveria erros, sobredosagem em órgãos de risco ou falha em cobrir o tumor.

Os resultados da Coorte II validaram a tecnologia. Foram gerados dados de 17 sessões de entrega emulada. Em 16 dessas 17 sessões (94,1%), a distribuição de dose guiada pelo PET ao vivo atingiu uma precisão extraordinária: 95% de todos os pontos de dose para o alvo e para os órgãos de risco caíram exatamente dentro das bandas de tolerância (o bDVH) planejadas pelo médico. O único caso que não atingiu a marca obteve 94,5% de precisão, um valor marginalmente abaixo do limiar estatístico, mas sem relevância clínica de toxicidade (não houve sobredosagem em órgãos sadios). Além da precisão dosimétrica, o estudo realizou testes de "entregabilidade" mecânica (*Machine Deliverability*). Comprovou-se que 100% dos complexos padrões de fluência gerados pelo algoritmo baseados nos pósitrons eram fisicamente executáveis pelas peças móveis do linac (gantry e colimador) sem causar falhas ou interrupções no maquinário.

Perfil de segurança do ponto de vista clínico, o BIOGUIDE-X estabeleceu um forte perfil de segurança para o fluxo de trabalho da BgRT. O acompanhamento rigoroso não identificou toxicidades na medula óssea ou na bexiga decorrentes das injeções de FDG repetidas, nem eventos adversos graves atribuídos ao funcionamento ou ao tempo de permanência na máquina do estudo. Os achados permitiram a liberação comercial pelo FDA (agência federal estadunidense) para tratar lesões pulmonares e ósseas com a tecnologia BgRT, marcando o início de uma nova era na oncologia onde a biologia molecular dita a terapia em tempo real.

11 CONCLUSÃO

O objetivo inicial desta pesquisa consistiu em compreender o funcionamento geral da tecnologia de radioterapia biologicamente guiada, estabelecendo um fluxo de análise que abrange desde a aquisição inicial de imagens e o acompanhamento da movimentação tumoral até a utilização da atividade metabólica para guiar a deposição da dose de radiação. A avaliação deste método evidencia a alta precisão dessa nova abordagem terapêutica, demonstrando que, apesar dos marcos já consolidados na oncologia, as tecnologias de tratamento continuam em constante evolução técnica. Diante dos mecanismos analisados, projeta-se um cenário clínico futuro no qual a integração de dados funcionais em tempo real será progressivamente adotada, visando otimizar a segurança do paciente e promover uma recuperação mais eficaz.

Os dados levantados atestam uma melhoria significativa na qualidade do planejamento radioterápico, proporcionando um rastreamento tumoral superior e uma maior eficiência opera-

cional quando comparado aos procedimentos convencionais de radioterapia guiada por imagem. Para a condução deste estudo, elegeu-se como objeto de análise a plataforma RefleXion X1. Este equipamento é composto por um sistema de tomografia computadorizada para a detecção anatômica inicial da lesão e um acelerador linear responsável pela emissão dos feixes de raios-X, dispensando o uso de fontes radioativas contínuas e aumentando a segurança radiológica da instalação. A arquitetura da máquina conta ainda com um sistema complexo de movimentação transversal, desenhado para manter a estabilidade do isocentro do paciente, e detectores PET integrados diretamente ao anel de irradiação, característica estrutural que maximiza a capacidade de acompanhar o alvo dinamicamente e direcionar o feixe com exatidão para o centro da atividade tumoral.

Referências

- [1] CLEVELAND CLINIC. **Tumor Suppressor Genes**. Cleveland: Cleveland Clinic, 2023. Disponível em: <https://my.clevelandclinic.org/health/body/24833-tumor-suppressor-genes>. Acesso em: 15 jun. 2026.
- [2] ROMERO-GARCIA, S. et al. Tumor cell metabolism: an integral view. **Cancer Biology & Therapy**, v. 12, n. 11, p. 939–948, 2011.
- [3] SCHLEGEL, W.; BÖHRINGER, T.; BONI, A. (ed.). **New Technologies in Radiation Oncology**. Berlim: Springer, 2006.
- [4] SOCIEDADE BRASILEIRA DE RADIOTERAPIA; FUNDAÇÃO DOM CABRAL. **RT-2030: Plano de desenvolvimento da radioterapia para a próxima década**. São Paulo: SBRT, 2019. Disponível em: <https://sbradioterapia.com.br/wp-content/uploads/2021/08/RT2030-final.pdf>. Acesso em: 01 jun. 2026.
- [5] GOIÁS. Secretaria de Estado da Saúde. **História do Césio-137 em Goiânia**. Goiânia: SES-GO, 2026. Disponível em: <https://goias.gov.br/saude/historia-do-cesio-137-em-goiania/>. Acesso em: 22 maio 2026.
- [6] OKUNO, E.; YOSHIMURA, E. **Física das Radiações**. São Paulo: Oficina de Textos, 2010.
- [7] PODGORSK, E. B. (ed.). **Radiation Oncology Physics: A Handbook for Teachers and Students**. Viena: International Atomic Energy Agency (IAEA), 2005.
- [8] ATTIX, F. H. **Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry**. Weinheim: Wiley-VCH, 1986.
- [9] SEGRETO, R. A.; SEGRETO, H. R. C. (org.). **Radiobiologia: Da Bancada à Clínica**. São Paulo: Atheneu, 2024.
- [10] KHAN, F. M.; GIBBONS, J. P. **The Physics of Radiation Therapy**. 6. ed. Philadelphia: Lippincott Williams & Wilkins, 2020.
- [11] INTERNATIONAL COMMISSION ON RADIATION UNITS AND MEASUREMENTS. **ICRU Report 83: Prescribing, Recording, and Reporting Intensity-Modulated Photon-Beam Therapy (IMRT)**. Bethesda: ICRU, 2010.
- [12] ICHIJ, K. et al. A Respiratory Motion Prediction Based on Time-Variant Seasonal Autoregressive Model for Real-Time Image-Guided Radiotherapy. **Frontiers in Radiation Oncology**, InTech, 2013.

- [13] JAFFRAY, D. A. Image-guided radiotherapy: from current concept to future perspectives. **Nature Reviews Clinical Oncology**, v. 9, n. 12, p. 688–699, 2012.
- [14] CAI, B. et al. Strategies for Offline Adaptive Biology-Guided Radiotherapy (BgRT) on a PET-Linac Platform. **Cancers**, v. 17, n. 15, p. 2470, 2025.
- [15] VITZTHUM, L. K. et al. The Future of Radiotherapy: Emerging Technologies and Novel Paradigms. **International Journal of Radiation OncologyBiologyPhysics**, v. 117, n. 4, p. 770-781, 2023.
- [16] ODERINDE, O. et al. Current status and future directions of adaptive radiotherapy. **Clinical and Translational Radiation Oncology**, v. 30, p. 57-65, 2021.
- [17] CHERRY, S. R.; SORENSON, J. A.; PHELPS, M. E. **Physics in Nuclear Medicine**. 4. ed. Philadelphia: Saunders/Elsevier, 2012.