

# DETERMINAÇÃO DE SEÇÕES DE CHOQUE INELÁSTICAS PARA NANOPARTÍCULAS DE OURO USANDO TDDFT.

**Palavras-Chave:** NANOPARTÍCULAS DE OURO, SEÇÕES DE CHOQUE, DFT

**Autores(as):**

**BEATRIZ ARCAIN DE OLIVEIRA, IFGW - UNICAMP**

**Prof<sup>(a)</sup>. Dr<sup>(a)</sup>. MARIO ANTONIO BERNAL RODRIGUEZ (orientador(a)), IFGW - UNICAMP**

---

## INTRODUÇÃO:

A radioterapia consiste em utilizar radiações ionizantes como raios X, Gamma, íons, elétrons e prótons para tratamentos médicos, como o tratamento contra o câncer e a imunossupressão. Estudam-se métodos de implementação de nanopartículas nesta prática para aumentar a dose depositada no tecido alvo e, conseqüentemente, a eficiência deste tipo de tratamento, uma destas nanopartículas estudadas é o ouro, que absorve maior dose por conta de seu alto número atômico, quando comparado ao do tecido humano, fazendo com que a deposição de dose no tecido alvo seja maior que a do tecido saudável. Para o desenvolvimento das pesquisas sobre os efeitos biológicos e químicos, tem-se como base simulações computacionais, como Monte Carlo, que baseiam seus cálculos em seções de choques dos materiais estudados, particularmente para o ouro estes dados são obtidos apenas para o ouro bulk, rede cristalina, desprezando os efeitos de tamanho do material. Partindo do formalismo TDDFT (Time-dependent density functional theory), podemos desenvolver e estudar a Seção de Choque inelástica de diferentes geometrias do ouro, sendo as escolhidas para este trabalho: Ouro Bulk, Ouro Voxel e o Átomo isolado de Ouro.

## METODOLOGIA:

Pela teoria de Bethe e pela aproximação de Born, podemos descrever qualquer interação de uma partícula carregada com uma matéria condensada pela sua função de resposta dielétrica, definida como  $\epsilon(E, K)$ , sendo  $E$  a energia e  $K$  o momento. Por meio do modelo TDDFT (Time-dependent density functional theory), que expande o DFT (Density Functional Theory) para outros estados acima do estado fundamental, consegue-se estudar a dinâmica de colisões entre os corpos e assim calcular a Função Dielétrica. Partindo de dados obtidos anteriormente para a colisão de um próton com um ouro bulk polarizado por meio de um pulso de Dirac unidimensional, calcula-se a Energy Loss Function, probabilidade de transferência de energia  $E$  por uma partícula rápida e carregada no limite de dipolo,

por meio de:  $\eta_2(E, 0) = \text{Im} \eta(E, 0) = \frac{-1}{\epsilon(E, 0)} = \frac{\epsilon_2(E, 0)}{\epsilon_1^2(E, 0) + \epsilon_2^2(E, 0)}$ . Esta função descreve o comportamento do material quando se absorve energia através da polarização, descrevendo também a deformação de suas moléculas.

A Energy Loss Function é utilizada como base para cálculo da Seção de Choque Dupla Diferencial Inelástica ( $K = 0$ ), onde os limites de integração são  $K_{\min} = \frac{\sqrt{2m}}{h} (\sqrt{T} - \sqrt{T - E})$  e  $K_{\max} = \frac{\sqrt{2m}}{h} (\sqrt{T} + \sqrt{T - E})$ , onde  $E$  é a energia transferida,  $K$  é o momento transferido,  $T$  é a energia cinética reduzida do projétil (próton) e  $\epsilon$  é a permissividade dielétrica do meio.

$$\frac{d\Sigma}{dE} = \frac{1}{\pi a_0 T} \int_{K_{\min}}^{K_{\max}} \eta_2(E, K) \frac{dK}{K} \rightarrow \frac{d\Sigma}{dE} = \frac{1}{\pi a_0 T} \eta_2(E, 0) [\ln|K_{\max}| - \ln|K_{\min}|]$$

## RESULTADOS E DISCUSSÃO:

A Energy Loss Function calculada para o Ouro Bulk está apresentada na *Figura 1*, m pode-se defini-lo em duas diferentes partes, a parte a esquerda, a discreta, que refere-se a picos de excitações e a parte vista a direita, que é contínua e referente a borda de ionização do material, além disso há a presença de artefatos e ruídos na forma de pequenos picos ao longo do gráfico.

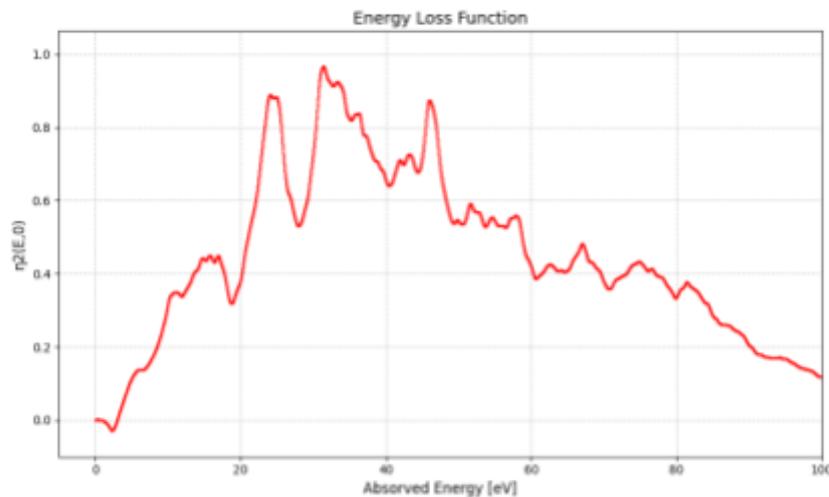


Figura 1. Energy Loss Function para o Ouro Bulk

Estes mesmos dados também foram dispostos em um gráfico de escala Semi-Log, onde nota-se que por volta de 425 eV, atinge-se o zero, sendo este o valor onde acontece a quebra da aproximação dipolar utilizada para o cálculo do modelo.

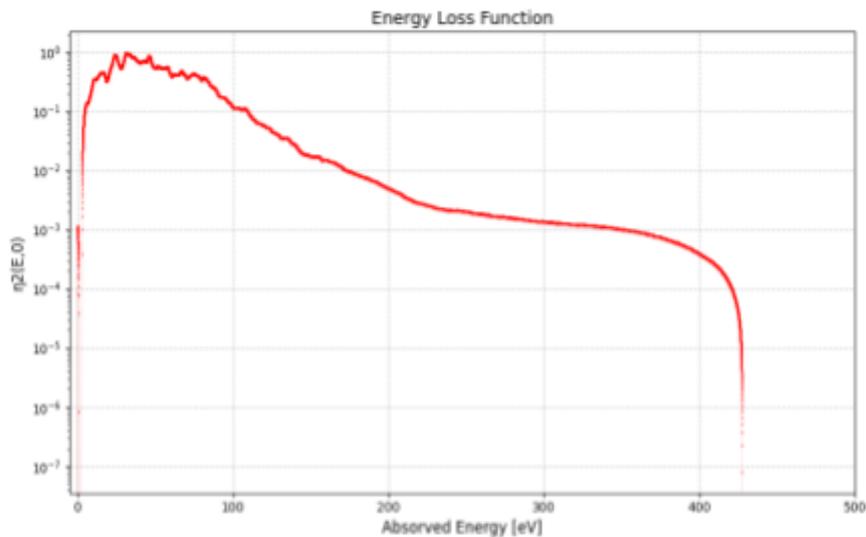


Figura 2. Energy Loss Function para o Ouro Bulk em escala Semi-Log

Os dados para a seção de choque estão apresentados na *Figura 3*, em escala Semi-Log, nota-se que há picos bem definidos, referentes a excitação e picos de menor tamanho, que são artefatos. Nota-se que prótons com maiores energias cinéticas incidentes possuem menores seções de choque para baixas energias, porém possuem uma longa "cauda" que se estende a maiores faixas de energia, quando comparados a Prótons de menores energias cinéticas incidentes.

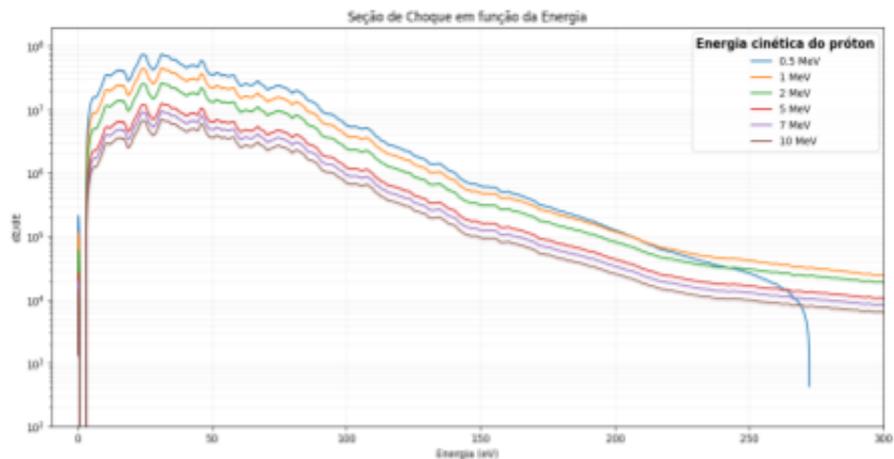


Figura 3. Seção de Choque Diferencial em escala Semi-Log.

## BIBLIOGRAFIA

DINGFELDER, Michael. **Electron inelastic scattering cross sections in liquid water.** Radiation Physics and Chemistry, 1998.

SERAIDE, Rodrigo; BERNAL, Mario A.; BRUNETTO, Gustavo; GIOVANNINI, Umberto de; RUBIO, Angel. **Tddft-based study on the proton–dna collision.** The Journal of Physical Chemistry B, 2017.

INOKUTI, Mitio. **Inelastic collisions of fast charged particles with atoms and molecules - The Bethe Theory.** Rev. Mod. Phys., Jul 1971.

HOHENBERG, P; KOHN, W. **Inhomogeneous electron gas.** Phys. Rev., Nov 1964.

SCHUEMANN, Jan et al. **Roadmap to clinical use of gold nanoparticles for radiation sensitization.** International Journal of Radiation Oncology, Biology, Physics, Volume 94, Issue 1.

BARNARD, Amanda S.; CURTISS, Larry A. **Predicting the shape and structure of face-centered cubic gold nanocrystals smaller than 3 nm.** ChemPhysChem, 2006.

WU, Kechen; LI Jun; LIN, Chensheng. **Remarkable second-order optical nonlinearity of nano-sized au<sub>20</sub> cluster: a tddft study.** Chemical Physics Letters, 2004.