



**INSTITUTO LATINO-AMERICANO DE
CIÊNCIAS DA VIDA E DA NATUREZA
(ILACVN)**

ENGENHARIA FÍSICA

**PROTOTIPAGEM DE FENDA CÔNICA IMPRESSA EM 3D PARA IDENTIFICAÇÃO
DE OXALATO DE CÁLCIO:
POSSÍVEL APLICAÇÃO PARA DIAGNÓSTICO NÃO INVASIVO DE
MICROCALCIFICAÇÕES MAMÁRIAS**

RENATA OLMEDO BENEDET

Foz do Iguaçu
2025

**PROTOTIPAGEM DE FENDA CÔNICA IMPRESSA EM 3D PARA IDENTIFICAÇÃO DE
OXALATO DE CÁLCIO:
POSSÍVEL APLICAÇÃO PARA DIAGNÓSTICO NÃO INVASIVO DE
MICROCALCIFICAÇÕES MAMÁRIAS**

RENATA OLMEDO BENEDET

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto Latino-Americano de Ciências da Vida e da Natureza da Universidade Federal da Integração Latino-Americana, como requisito parcial à obtenção do título de Bacharel em Engenharia Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Gonçalves Hönnicke

Foz do Iguaçu
2025

RENATA OLMEDO BENEDET

**PROTOTIPAGEM DE FENDA CÔNICA IMPRESSA EM 3D PARA IDENTIFICAÇÃO DE
OXALATO DE CÁLCIO:
POSSÍVEL APLICAÇÃO PARA DIAGNÓSTICO NÃO INVASIVO DE
MICROCALCIFICAÇÕES MAMÁRIAS**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto Latino-Americano de Ciências da Vida e da Natureza da Universidade Federal da Integração Latino-Americana, como requisito parcial à obtenção do título de Bacharel em Engenharia Física.

BANCA EXAMINADORA

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Gonçalves Hönnicke
UNILA

Prof. Dr. Rodrigo Leonardo de Oliveira Basso
UNILA

Prof. Dr. Gustavo de Jesus López Núñez
UNILA

Foz do Iguaçu, _____ de _____ de _____.

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar agradeço ao Professor Marcelo pela orientação, atenção e encorajamento, por ser uma boa pessoa e pelo excelente tratamento com seus alunos e todas as pessoas ao seu redor. Agradeço a oportunidade e compartilhamento de conhecimentos, pelas indicações de eventos onde apresentei nossos trabalhos que proporcionaram experiências extremamente únicas e formadoras da pessoa que me tornei.

Agradeço ao meu parceiro de vida Bruno por me acompanhar nesta trajetória e vivenciar a graduação junto comigo, por termos conseguido enfrentar uma pandemia juntos e por continuar me apoiando em todos os momentos, só nós dois sabemos pelo que passamos durante estes anos. Quem diria que chegaríamos até aqui?

Agradeço também à Paula, técnica do laboratório de química, pela disposição e auxílio no processo de síntese do oxalato de cálcio duplamente hidratado. Sempre querida e alegre.

Meu grande agradecimento à UNILA pela oportunidade de cursar Engenharia Física e tornar meu sonho realidade, pelos auxílios financeiros essenciais para que eu conseguisse me manter na universidade. Ao CNPq pelas bolsas de iniciação tecnológica e iniciação científica.

Agradeço aos meus pais que sempre se esforçaram muito para que eu pudesse ter acesso ao ensino que eles não tiveram, e fizeram com que eu gostasse de estudar desde pequena.

Por fim, agradeço a todos os meus bons Professores que contribuíram para meu conhecimento e proporcionaram minha chegada até aqui.

Houve um aumento alarmante no número de coisas que eu não sei nada sobre.

Imagem introdutória de BUSHBERG, J. T. et al. The Essential Physics of Medical Imaging

RESUMO

O câncer de mama é a neoplasia mais incidente e a principal causa de mortalidade oncológica entre as mulheres. A mamografia é amplamente utilizada como método de rastreamento, mas enfrenta limitações na especificidade, especialmente na detecção de microcalcificações, que podem representar tanto alterações benignas quanto indícios precoces de carcinoma ductal *in situ*. Um dos principais desafios está na diferenciação entre microcalcificações benignas, como as de oxalato de cálcio duplamente hidratado (OCDH), e as malignas, geralmente compostas por hidroxiapatita. Este trabalho tem como objetivo investigar o uso de uma fenda cônica, prototipada por impressão 3D, para aprimorar a detecção de microcalcificações por difração de raios X. O OCDH foi sintetizado e caracterizado estruturalmente. Foram realizados testes de difração em um arranjo experimental com e sem a fenda cônica, utilizando amostras de OCDH e gordura suína como meio simulador de tecido adiposo. Os resultados demonstraram que a fenda melhora o contraste angular dos padrões difratados do OCDH. No entanto, o espalhamento da radiação pelo meio adiposo interferiu na seletividade do sinal. A partir dos resultados obtidos, sugerimos melhorias no dispositivo para minimizar o espalhamento, como aumento do comprimento e ajustes no material de impressão. A fenda cônica demonstrou potencial para aprimorar a seletividade do sinal difratado e pode representar um avanço na caracterização de microcalcificações.

Palavras-chave: fenda cônica; microcalcificações; difração de raios X; mamografia; impressão 3D.

RESUMEN

El cáncer de mama es la neoplasia más frecuente y la principal causa de mortalidad oncológica en mujeres. La mamografía se utiliza ampliamente como método de tamizaje, pero presenta limitaciones en su especificidad, especialmente en la detección de microcalcificaciones, las cuales pueden representar tanto alteraciones benignas como indicios tempranos de carcinoma ductal in situ. Uno de los principales desafíos radica en diferenciar las microcalcificaciones benignas, como las de oxalato de calcio dihidratado (OCDH), de las malignas, generalmente compuestas por hidroxapatita. Este trabajo tiene como objetivo investigar el uso de una rendija cónica, prototipada mediante impresión 3D, para mejorar la detección de microcalcificaciones mediante difracción de rayos X. Se sintetizó y caracterizó estructuralmente el OCDH. Se realizaron pruebas de difracción en un montaje experimental con y sin la rendija cónica, utilizando muestras de OCDH y grasa porcina como medio simulador de tejido adiposo. Los resultados demostraron que la rendija mejora el contraste angular de los patrones de difracción del OCDH. Sin embargo, la dispersión de la radiación por el medio adiposo interfirió en la selectividad de la señal. A partir de los resultados obtenidos, se proponen mejoras en el dispositivo para reducir la dispersión, como el aumento de la longitud y ajustes en el material de impresión. La rendija cónica mostró potencial para mejorar la selectividad de la señal difractada y podría representar un avance en la caracterización de microcalcificaciones.

Palabras clave: rendija cónica; microcalcificaciones; difracción de rayos X; mamografía; impresión 3D.

ABSTRACT

Breast cancer is the most common neoplasm and the leading cause of cancer-related mortality among women. Mammography is widely used as a screening method but faces limitations in specificity, especially in the detection of microcalcifications, which may indicate both benign alterations and early signs of ductal carcinoma in situ. One of the major challenges is distinguishing benign microcalcifications, such as those composed of dihydrated calcium oxalate (DHCO), from malignant ones, which are predominantly composed of hydroxyapatite. This study aims to investigate the use of a conical slit, prototyped via 3D printing, to improve the detection of microcalcifications through X-ray diffraction. DHCO crystals were synthesized and structurally characterized. Diffraction tests were conducted in an experimental setup with and without the conical slit, using DHCO samples and commercial pork lard as a tissue-mimicking medium. The results showed that the slit improved the angular contrast of the DHCO diffraction patterns. However, radiation scattering by the adipose medium reduced signal selectivity. Based on these findings, improvements are suggested for the device design to minimize scattering, such as increasing slit length and optimizing the printing material. The conical slit demonstrated potential to enhance diffracted signal selectivity and may represent an advance in the non-invasive characterization of microcalcifications.

Keywords: conical slit; microcalcifications; X-ray diffraction; mammography; 3D printing.

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1** - Mamografias de rastreamento mostrando (A)(B) microcalcificações "pequenas, redondas e agrupadas" e (C)(D) microcalcificações "pequenas, redondas e segmentares". 14
- Figura 2** - Padrões de distribuição comumente observados de calcificações mamárias detectadas por mamografia, em ordem de aumento da probabilidade de malignidade. A ordem é: difuso, regional, em cluster, segmental e linear. 15
- Figura 3** - Microscopia Eletrônica de varredura de: A) whewellitita; B) weddelita. 18
- Figura 4** - Espectro de raios X, para um alvo de molibdênio (Mo) em função da voltagem aplicada. As larguras das linhas não estão em escala. 21
- Figura 5** - A) Transmissão e B) retroflexão do método de Laue. C) Transmissão e D) Padrões de retro reflexão de Laue de um cristal de alumínio (estrutura cúbica de corpo centrado - CFC). Radiação de tungstênio, 30 kV, 19mA. 23
- Figura 6** - Formação de um cone de radiação difratada no método em pó..... 23
- Figura 7** - Método de pó de Hull/Debye–Scherrer: Acima a relação do filme com a amostra e o feixe incidente. Abaixo a aparência do filme quando colocado plano. 24
- Figura 8** - Padrões de difração em pó de Hull/Debye–Scherrer de: A) cobre (CFC), B) tungstênio (estrutura cúbica de corpo centrado - CCC) e C) zinco (estrutura hexagonal compacta - HC). Radiação de cobre filtrada ($\text{CuK}\alpha$), diâmetro da câmera = 5,73 cm 24
- Figura 9** - Parâmetros geométricos da fenda cônica. (A) Representação esquemática do foco da fenda cônica (F). (B) Representação esquemática da profundidade de foco da fenda cônica (DoF). 30
- Figura 10** - Alguns passos da síntese do oxalato de cálcio duplamente hidratado (OCDH). a) Controle de temperatura para adicionar oxalato de sódio ao cloreto de cálcio. b) Cristalização, após 24 horas, em uma solução sem agitação. c) OCDH no filtro. d)-e) OCDH removido do filtro. f) Amostras de OCDH prontas para análise. 34
- Figura 11** - Experimento montado no difratômetro multiusuário da UNILA, para testes da fenda cônica impressa em 3D. (a) Vista lateral enfatizando as distâncias da fonte ao detector e da amostra ao detector; (b) Vista superior mostrando: (i) tubo de raios X (alvo de Mo em geometria foco ponto); (ii) colimador (fendas cruzadas); (iii) estágio multi-eixos, para fixação da amostra; (iv) amostra; (v) fenda cônica e; (vi) detector flat panel. 36
- Figura 12** - Resultados de difração de raios X obtidos com radiação $\text{CuK}\alpha$ ($\sim 1,542 \text{ \AA}$). Em azul, o difratograma do oxalato de cálcio duplamente hidratado [OCDH - ICSD 030783 - fase weddelita - $\text{CaC}_2\text{O}_4(\text{H}_2\text{O})_{2,375}$] que foi sintetizado, resultado de 50 semanas após síntese, porém mantido a $\sim 3 \text{ }^\circ\text{C}$. Em preto, o difratograma do oxalato de cálcio monohidratado comercial e termodinamicamente estável [OCMH – ICSD 158939 - fase whewellitita - $\text{CaC}_2\text{O}_4\text{H}_2\text{O}$]. As indexações ICSD foram estabelecidas com base nos índices de Miller indicados nos difratogramas..... 38
- Figura 13** - (a) Microscopia eletrônica de varredura (MEV) do OCDH sintetizado. (b) Espectroscopia de raios X por dispersão de energia (EDS) do OCDH sintetizado, obtida na

mesma amostra mostrada em (a).....39

Figura 14 - Difrátogramas da banha de porco comercial e OCDH, obtidos com radiação $\text{CuK}\alpha$ ($\sim 1,542 \text{ \AA}$), destacando os picos de difração selecionados (mais intensos), usados para o projeto de fenda cônica impressa em 3D.40

Figura 15 - Design de fenda cônica: (a) Observando a máscara de entrada e (b) observando a máscara de saída; (c) impressão 3D em ácido polilático (PLA). Os outros parâmetros da fenda, para $\text{MoK}\alpha$ ($\sim 0,711 \text{ \AA}$), encontram-se nas Tabelas 1 e 2.....41

Figura 16 - Imagens projetadas da difração de (a) OCDH e (b) banha de porco comercial, com $\text{MoK}\alpha$ ($\sim 0,711 \text{ \AA}$) e o detector flat panel, sem a fenda cônica impressa em 3D. Para comparações de padrões de dispersão, uma imagem com a fenda tirada com os mesmos parâmetros de (a) e (b) (sem as amostras), é mostrada em (c). Os perfis radiais das imagens, tiradas nas áreas limitadas pelos círculos tracejados nas imagens (a-c), são mostrados em (d-f), respectivamente. I_0 é a intensidade máxima para o DHCO.42

Figura 17 - Imagens projetadas dos cones de difração/espalhamento de (a) OCDH e (b) banha de porco comercial, obtidas com $\text{MoK}\alpha$ ($\sim 0,711 \text{ \AA}$), a fenda cônica impressa em 3D e o detector plano bidimensional. Para comparações de padrões de espalhamento, (c) é mostrada uma imagem com a fenda obtida com os mesmos parâmetros de (a) e (b) (sem as amostras). Os perfis radiais das imagens (a-c) são mostrados em (d-f), respectivamente. I_0 é a intensidade máxima para o OCDH sem a fenda cônica.....43

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	12
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	14
2.1 MICROCALCIFICAÇÕES EM MAMAS.....	14
2.1.1 Importância clínica e desafios na detecção	15
2.1.2 Localização anatômica e classificação morfológica.....	15
2.1.3 Influência da faixa etária e da densidade mamária.....	16
2.1.4 Composição físico-química das microcalcificações	17
2.1.5 Limitações da mamografia e necessidade de novas abordagens	18
2.2 DIFRAÇÃO DE RAIOS X.....	20
2.2.1 Natureza e Produção de Raios X.....	20
2.2.2 Lei de Bragg	21
2.2.3 Métodos de Difração de Raios X	22
2.3 DETECTORES DE RAIOS X E MAMOGRAFIA	25
2.3.1 Detectores de Raios X.....	25
2.3.2 Qualidade de Imagem e Dosimetria.....	27
2.4 PRINCÍPIOS DE FENDAS PARA RADIAÇÃO.....	28
2.4.1 Fendas cônicas como Filtros Espaciais	29
2.4.2 Vantagens da fenda cônica.....	31
2.5 MATERIAIS SIMULADORES (FANTOMAS).....	31
3 METODOLOGIA.....	34
4 RESULTADOS E CONCLUSÕES	38
5 CONSIDERAÇÕES FINAIS	45
6 EVENTOS E PUBLICAÇÕES	46
REFERÊNCIAS	47

1 INTRODUÇÃO

O câncer de mama é o mais incidente e o maior causador de mortalidade por câncer entre as mulheres. Segundo o Instituto Nacional de Câncer (INCA), em 2023 o Brasil registrou 73610 casos da doença. A detecção precoce é considerada um fator essencial para o sucesso do tratamento. Atualmente, a mamografia permanece como método principal de rastreamento utilizado tanto nos sistemas de saúde públicos como privados.

Apesar da relevância clínica, a interpretação das mamografias ainda representa um desafio para os profissionais da saúde, um dos principais é a presença de estruturas benignas que imitam características suspeitas, como ocorre no caso das microcalcificações. Essas formações, com cerca de 0,5 mm de diâmetro, podem ser os primeiros indícios radiográficos de alterações malignas, mas também estão associadas a condições não cancerosas, como depósitos de oxalato de cálcio duplamente hidratado (Chinyama, 2004).

Como a mamografia é amplamente utilizada para rastreamento de câncer de mama, a ocorrência de falsos-positivos é um problema que vem sendo estudado. Um estudo realizado por Santos *et al.* (2023) analisou dados de 10671 mulheres brasileiras e encontrou que 46,2% dos exames histopatológicos subsequentes a mamografias de rastreamento resultaram em diagnósticos benignos. A taxa de resultados falso-positivos foi estimada em 8,18 casos por 100 mulheres na faixa etária de 40-49 anos e 6,06 por 100 mulheres entre 50-59 anos. Estes resultados ressaltam a necessidade de aprimorar os métodos diagnósticos para reduzir procedimentos invasivos desnecessários e o impacto psicológico nas pacientes.

Dentre as microcalcificações benignas, as compostas por oxalato de cálcio destacam-se por apresentarem características físico-químicas e cristalográficas bem definidas. Estudos indicam que essas microcalcificações possuem forma cristalina específica e padrões de difração distintos dos encontrados em microcalcificações malignas, que em maioria são compostas por fosfato de cálcio (Baker *et al.*, 2010). Essa diferenciação é clinicamente relevante, uma vez que pode reduzir o número de biópsias desnecessárias, evitando procedimentos invasivos, custosos e muitas vezes traumáticos.

Com o avanço das técnicas aplicadas à medicina diagnóstica, a utilização de difração de raios X mostra-se promissora para a caracterização de microestruturas em tecidos biológicos. Um exemplo é a implementação de fendas cônicas, que funcionam como

filtros espaciais capazes de atenuar o espalhamento incoerente e melhorar a relação sinal-ruído na captação do padrão difratado, esta estratégia foi explorada por Fioreze *et al.* (2017) e demonstrou que o uso do dispositivo pode resultar em maior precisão na identificação de padrões cristalográficos.

Neste contexto, o presente trabalho tem como objetivo o desenvolvimento de uma fenda cônica produzida por impressão 3D, projetada para atuar como filtro espacial no sistema de difração de raios X. A proposta envolve a inserção do dispositivo entre a amostra (composta por cristais de oxalato de cálcio duplamente hidratado, sintetizados em laboratório, imerso em material adiposo) e o detector, a fim de aumentar a relação sinal ruído, uma vez que o espalhamento do tecido adiposo é comparável ao sinal de difração dos cristais de oxalato de cálcio. A relevância deste estudo reside na possibilidade de propor uma solução experimental de baixo custo, com potencial aplicabilidade no aprimoramento da acurácia de técnicas de imagem em contextos clínicos. O trabalho insere-se num campo interdisciplinar e pode contribuir para o avanço do conhecimento na interface entre a física médica, engenharia de materiais e a instrumentação experimental.

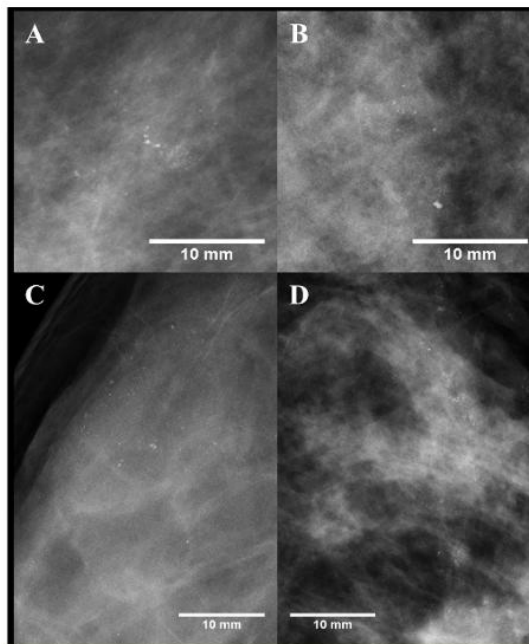
Este trabalho está organizado da seguinte forma: o Capítulo 2 apresenta o referencial teórico. O capítulo 3 descreve os materiais e métodos empregados na síntese dos cristais e na construção do arranjo experimental. O capítulo 4 apresenta as conclusões e as perspectivas futuras deste estudo. Por último o capítulo 5 as considerações finais.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 MICROCALCIFICAÇÕES EM MAMAS

Microcalcificações são pequenos depósitos de sais de cálcio que se acumulam no tecido mamário, geralmente com diâmetro inferior a 0,5 mm (Sickles, 1986). Sua detecção é fundamental na prática clínica, uma vez que essas estruturas podem representar tanto alterações benignas quanto indicadores precoces de carcinoma ductal *in situ* (CDIS), uma das formas iniciais de câncer de mama (O'Grady e Morgan, 2018).

Figura 1 - Mamografias de rastreo mostrando (A)(B) microcalcificações "pequenas, redondas e agrupadas" e (C)(D) microcalcificações "pequenas, redondas e segmentares".



Fonte: Fushimi *et al.*, 2018.

A Figura 1 apresenta: (A) microcalcificações benignas pequenas, redondas e agrupadas obtidas de uma paciente do gênero feminino com idade de 46 anos; (B) microcalcificações malignas pequenas, redondas e agrupadas da mama direita obtidas de uma paciente do gênero feminino com idade de 47 anos. Ela submeteu-se a uma cirurgia conservadora da mama e ressecção de linfonodos axilares; (C) Microcalcificações benignas pequenas, redondas e segmentares obtidas de uma paciente do gênero feminino com idade de 31 anos; (D) Microcalcificações malignas pequenas, redondas e segmentares da mama esquerda obtidas de uma paciente do gênero feminino com idade de 55 anos. Ela submeteu-se a uma cirurgia conservadora da mama e biópsia do linfonodo sentinela

(Fushimi *et al.*, 2018).

2.1.1 Importância clínica e desafios na detecção

As microcalcificações são frequentemente identificadas durante exames de mamografia, que possui alta sensibilidade para estruturas com elevada densidade radiográfica, como o cálcio (Santos *et al.*, 2023). Embora apresente alta sensibilidade, a mamografia apresenta limitações na especificidade, principalmente em mamas mais densas, nas quais a presença de grande quantidade de tecido fibroglandular pode dificultar a visualização adequada das microcalcificações, aumentando a taxa de falso-negativos.

O Ensaio de Triagem de Imagem Mamográfica Digital (*Digital Mammographic Imaging Screening Trial - DMIST*), conduzido por Pisano *et al.*, (2005), demonstrou que a mamografia digital apresenta desempenho significativamente superior à mamografia convencional em pacientes do gênero feminino com idade abaixo de 50 anos e com mamas densas. Contudo, mesmo os sistemas digitais enfrentam limitações.

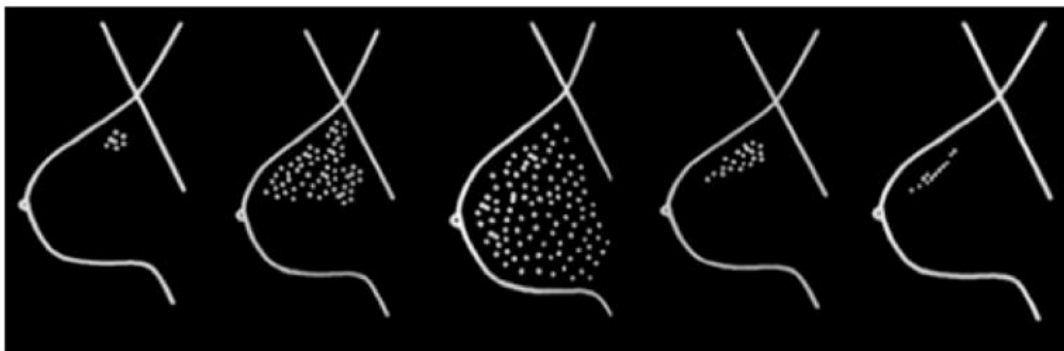
Além disso, fatores como a espessura da mama durante a compressão mamária, a qualidade da reconstrução da imagem e a resolução espacial dos sistemas de detecção também afetam diretamente a capacidade de visualização de microcalcificações.

2.1.2 Localização anatômica e classificação morfológica

Anatomicamente, muitas microcalcificações mamárias, inclusive aquelas associadas a processos patológicos, se formam nas Unidades Ducto-Lobulares Terminais (TDLUs), que estão envolvidas em vários processos neoplásicos (Logullo *et al.*, 2022).

Quanto à morfologia e ao padrão de distribuição, podem ser classificadas em: difuso, regional, agrupadas, segmentares e lineares, como representadas na Figura 2.

Figura 2 - Padrões de distribuição comumente observados de calcificações mamárias detectadas por mamografia, em ordem de aumento da probabilidade de malignidade. A ordem é: difuso, regional, em cluster, segmental e linear.



Fonte: adaptado de Valido *et al.*, 2020.

De acordo com Shin et al. (2010), a taxa de malignidade é de aproximadamente 38% nas agrupadas, 83% nas lineares e 81% nas segmentares, enquanto microcalcificações dispersas raramente estão associadas a câncer.

2.1.3 Influência da faixa etária e da densidade mamária

Em termos de faixa etária, as microcalcificações são mais comuns em pacientes do gênero feminino com idade acima dos 50 anos, refletindo processos de envelhecimento natural e involução do tecido mamário (Pisano *et al.*, 2005, p.1774). No entanto, a presença de microcalcificações em pacientes mais jovens, especialmente abaixo dos 40 anos, pode ter um maior valor preditivo de malignidade e costuma demandar investigação mais detalhada (Fushimi *et al.*, 2018).

A densidade mamária é um dos fatores anatômicos mais relevantes na detecção de microcalcificações por mamografia. Ela corresponde à proporção de tecido fibroglandular em relação ao tecido adiposo presente na mama, influenciando diretamente a atenuação do feixe de raios X e o contraste radiográfico das estruturas internas. (Obenauer *et al.*, 2006).

De acordo com a classificação do *American College of Radiology (ACR)*, as mamas podem ser divididas em quatro categorias, baseadas no grau de densidade observado na mamografia, como mostra o Quadro 1:

Quadro 1 – Classificação da densidade do tecido mamário segundo o ACR

Tipo ACR	Descrição	Precisão Diagnóstica
1	Predominantemente gordurosa	Muito alta
2	Fibroglandular	Alta
3	Heterogeneamente densa	Limitada
4	Extremamente densa	Limitada

Fonte: Adaptado de Obenauer *et al.*, 2006.

Estudos indicam que, à medida que a densidade aumenta, a sensibilidade dos sistemas de detecção assistida por computador (CAD) diminui. No trabalho de Obenauer *et al.* (2006), foi avaliada a eficácia de um sistema CAD aplicado a mamografias digitais de campo total. Os resultados mostraram que a taxa de detecção de lesões foi de 84,85% nas mamas do tipo ACR 1, enquanto caiu para 69,70% nas mamas do tipo ACR 4, considerando a incidência mediolateral oblíqua (MLO).

Além da queda de sensibilidade, o estudo também destacou que o CAD apresentou mais limitações para identificar lesões em mamas densas, tanto na incidência craniocaudal (CC) quanto na MLO (Obenauer *et al.*, 2006).

2.1.4 Composição físico-química das microcalcificações

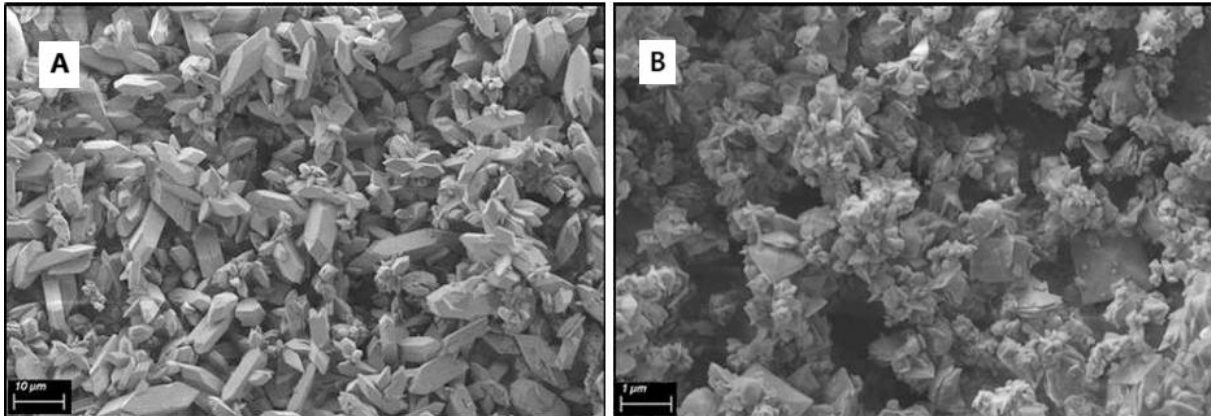
A composição mineral das microcalcificações mamárias está diretamente relacionada ao tipo de lesão que as origina, sendo reconhecida como um fator relevante no diagnóstico por imagem. Estudos histoquímicos e espectroscópicos identificaram duas classes principais de microcalcificações: tipo I, compostas predominantemente por oxalato de cálcio di-hidratado (OCDH) (weddelita), e tipo II, constituídas por fosfato de cálcio, geralmente na forma de hidroxiapatita carbonatada (Haka *et al.*, 2002; Baker *et al.*, 2010).

No estudo de Haka *et al.* (2002), a espectroscopia Raman foi utilizada para diferenciar os tipos de microcalcificações com base em suas bandas vibracionais. O tipo I apresentou bandas de absorção características de oxalato de cálcio em 912, 1477 e 1632 cm^{-1} . O mesmo foi encontrado quase exclusivamente em lesões benignas, como cistos fibrocísticos (Haka *et al.*, 2002). Por outro lado, o tipo II — composto por hidroxiapatita — esteve presente em maior número, inclusive em lesões malignas como o carcinoma ductal *in situ* (CDIS), evidenciando seu valor diagnóstico limitado, se considerado isoladamente (Haka *et al.*, 2002).

A estrutura cristalina das formas de oxalato de cálcio foi analisada em detalhe por Tazzoli e Domeneghetti (1980), que descreveram os parâmetros de rede e simetria de duas fases: a whewellita ($\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$), com estrutura monoclinica (grupo espacial $P2_1/c$), e a weddelita ($\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$), com estrutura tetragonal (grupo espacial $I4/m$) (Tazzoli; Domeneghetti, 1980). Essas fases são identificadas tanto por técnicas de difração de raios X quanto por espectroscopia vibracional, e apresentam diferentes morfologias cristalinas, como observado por Valido *et al.* (2020).

O estudo de Valido *et al.* (2020) investigou a transformação estrutural entre weddelita e whewellita, demonstrando que a perda controlada de água leva à conversão da forma di-hidratada para a monohidratada. Essa transformação é acompanhada por alterações no padrão de difração de raios X e nos espectros vibracionais, como o deslocamento de bandas de estiramento do grupo C=O (Valido *et al.*, 2020). Além disso, observou-se que os cristais de whewellita tendem a ser maiores e mais bem definidos, enquanto os de weddelita são menores e apresentam morfologia bipiramidal, como mostra a Figura 3 (Valido *et al.*, 2020).

Figura 3 - Microscopia Eletrônica de Varredura de: A) whewellita; B) weddelita.



Fonte: adaptado de Valido *et al.*, 2020.

Baker *et al.* (2010) analisaram a relação entre o conteúdo mineral (fosfato) e a matriz orgânica (proteínas) em microcalcificações, por meio da espectroscopia de infravermelho por transformada de Fourier (FTIR). Microcalcificações malignas apresentaram maior razão amida/fosfato e menor teor de carbonato na hidroxiapatita (1,41%), em comparação com as benignas (2,08%), sugerindo maior presença de proteínas estruturais e mineralização incompleta em lesões cancerígenas (Baker *et al.*, 2010).

Scott *et al.* (2016) aplicaram difração de raios X *in situ* em cortes histológicos de tecido mamário e identificaram que a hidroxiapatita presente nas microcalcificações malignas é nanocristalina, com cristais de baixa coerência e tamanho reduzido. O estudo não encontrou evidências da presença de oxalato de cálcio nas amostras analisadas (Scott *et al.*, 2016), o que sugere que a predominância de hidroxiapatita pode ser uma característica da progressão neoplásica. Além disso, observaram a presença crescente de whitlockita, um fosfato de cálcio com magnésio, associada a lesões malignas mais avançadas (Scott *et al.*, 2016).

Esses resultados indicam que, além da identificação da composição química básica, o grau de cristalinidade, a presença de substituições iônicas, a razão mineral/matriz orgânica e a morfologia cristalina são fatores que podem oferecer maior sensibilidade e especificidade na diferenciação entre lesões benignas e malignas. O uso de técnicas como a difração de raios X, FTIR e espectroscopia Raman, portanto, é essencial para aprofundar o entendimento das microcalcificações e seu papel no diagnóstico precoce do câncer de mama.

2.1.5 Limitações da mamografia e necessidade de novas abordagens

Apesar dos benefícios no rastreamento do câncer da mama, a mamografia

enfrenta desafios que limitam a sua eficácia plena. Uma das principais controvérsias reside na eficácia do rastreio populacional, pois muitos estudos mostram que uma parcela das lesões detectadas são crescimentos pequenos e benignos que dificilmente progridem para câncer, a eficácia clínica do rastreio mamográfico é comprometida por um baixo valor preditivo positivo, o que significa que muitas anomalias detectadas levam a investigações adicionais, incluindo biópsias, que posteriormente se revelam benignas (O'Grady e Morgan, 2018).

A ambiguidade na caracterização de microcalcificações é outra limitação crítica. As microcalcificações são as estruturas mais pequenas identificadas nas mamografias, exigindo técnicas de imagem de alta resolução para uma visualização ótima. Contudo, as maiores dificuldades de interpretação surgem com calcificações pequenas e agrupadas que não apresentam formas caracteristicamente malignas. Lesões tanto benignas quanto malignas podem ter essa aparência mamográfica. Nestas situações, a maioria dos radiologistas recomenda a biópsia, embora apenas cerca de 20% a 30% desses casos se revelem câncer (Sickles, 1986). Mesmo com imagens de última geração, muitos aglomerados benignos de calcificações podem não ser suficientemente claros para demonstrar formas benignas, o que mantém a malignidade como uma possibilidade diagnóstica importante e justifica a biópsia.

Outra limitação fundamental é a incapacidade das técnicas de imagem clínicas padrão atuais de diferenciar de forma fiável as microcalcificações Tipo I das Tipo II (O'Grady e Morgan, 2018). Esta incapacidade de distinguir a composição química impede a utilização de informações valiosas que têm uma forte associação com a benignidade ou malignidade das lesões.

As limitações da mamografia, particularmente a sua incapacidade de fornecer uma caracterização definitiva e não invasiva das microcalcificações, impulsionam a necessidade urgente de novas abordagens (O'Grady e Morgan, 2018). Em primeiro lugar, a redução de biópsias desnecessárias é um objetivo primordial. A incapacidade de diferenciar de forma fiável as calcificações Tipo I das Tipo II, ou de identificar com clareza a benignidade de aglomerados ambíguos, resulta em um número significativo de biópsias que se revelam benignas (Sickles, 1986). Uma capacidade de deteção química não invasiva dessas calcificações poderia, por conseguinte, reduzir substancialmente o número de pacientes que necessitam de procedimentos de biópsia invasivos. Em segundo lugar, a melhoria do poder diagnóstico e prognóstico é crucial. Existe um impulso significativo para aprimorar as técnicas de imagem da mama (O'Grady e Morgan, 2018).

Em síntese, as limitações inerentes à mamografia na caracterização definitiva das microcalcificações, particularmente no que diz respeito à sua composição química e potencial malignidade, sublinham a urgência de desenvolver novas abordagens (O'Grady e Morgan, 2018). Tais avanços prometem não só melhorar a precisão do diagnóstico precoce, mas também otimizar a gestão da paciente, reduzindo a necessidade de procedimentos invasivos e informando melhor as decisões prognósticas e terapêuticas.

2.2 DIFRAÇÃO DE RAIOS X

A difração de raios X (DRX) é um dos métodos mais amplamente utilizados para a caracterização estrutural de materiais. Seu princípio físico baseia-se na interação coerente de ondas eletromagnéticas com a estrutura periódica dos cristais, resultando em um padrão de interferência que contém informações sobre o arranjo atômico interno (Cullity; Stock, 2014).

2.2.1 Natureza e Produção de Raios X

Os raios X são uma forma de radiação eletromagnética, de natureza idêntica à luz visível, mas com comprimentos de onda muito menores, tipicamente na faixa de 0,5 a 2,5 Å (angstroms = $10^{-10}m$), enquanto a luz visível tem comprimentos de onda da ordem de 6000 Å. Eles se situam entre os raios gama e ultravioleta no espectro eletromagnético.

A produção de raios X ocorre quando partículas eletricamente carregadas com energia cinética suficiente, geralmente elétrons, são rapidamente desaceleradas. Em um tubo de raios X, os elétrons são acelerados por uma alta voltagem (dezenas de milhares de volts) em direção a um ânodo metálico, conhecido como alvo. No ponto de impacto, uma pequena fração da energia cinética dos elétrons (menos de 1%) é convertida em raios X, sendo a maior parte dissipada como calor. Por isso, o alvo precisa ser resfriado.

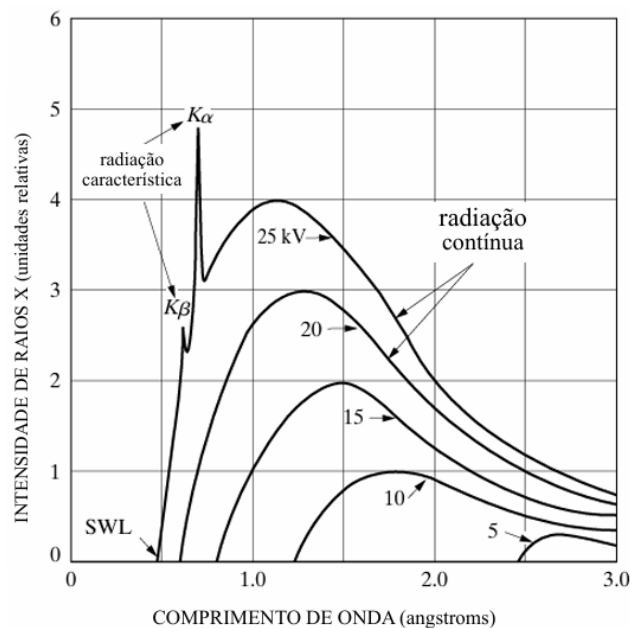
O espectro de raios X emitido pelo alvo é composto por duas partes:

Espectro Contínuo (Bremsstrahlung): Esta radiação é policromática (ou branca) e contínua. Ela é resultado da desaceleração dos elétrons ao atingirem o alvo.

Espectro Característico: Quando a voltagem do tubo ultrapassa um valor crítico para o metal do alvo, máximos de intensidade nítidos aparecem em comprimentos de onda específicos, superpostos ao espectro contínuo. Essas são as linhas características, agrupadas em séries K, L, M etc., em ordem crescente de comprimento de onda. Para o

molibdênio (Figura 4), por exemplo, as linhas K têm cerca de 0,7 Å. As linhas $K\alpha_1$, $K\alpha_2$ e $K\beta$ são as mais fortes e úteis na difração de raios X. A origem dessas linhas está na excitação dos átomos do alvo: um elétron acelerado pode ejetar um elétron de um nível de energia ligado ao átomo do alvo (por exemplo, K), e um elétron de um nível de energia mais externo pode preencher o nível do elétron ejetado, emitindo luz na forma de radiação X característica.

Figura 4 - Espectro de raios X, para um alvo de molibdênio (Mo) em função da voltagem aplicada. As larguras das linhas não estão em escala.



Fonte: Adaptado de Cullity; Stock, 2014.

A existência da forte e nítida linha $K\alpha$ é crucial para a difração de raios X, pois muitos experimentos exigem radiação aproximadamente monocromática.

2.2.2 Lei de Bragg

A difração de raios X por cristais foi demonstrada experimentalmente por Friedrich e Knipping sob a direção de von Laue em 1912, provando simultaneamente a natureza ondulatória dos raios X e a periodicidade da arrumação dos átomos nos cristais. Quase concomitantemente à Laue, W.H. Bragg e W.L. Bragg (pai e filho) formularam, em 1913, uma relação matemática mais simples para as condições de difração.

Um cristal é definido como um sólido composto por átomos, íons ou moléculas arranjadas em um padrão periódico em três dimensões. Essa periodicidade pode ser representada por uma rede, um arranjo tridimensional de pontos. A célula unitária é a menor unidade que se repete para formar o cristal.

A difração de raios X ocorre devido à interferência construtiva de raios X espalhados pelos átomos em planos paralelos dentro do cristal. A Lei de Bragg descreve a condição para essa interferência construtiva:

$$n \lambda = 2 d \sin \theta \quad (1)$$

Onde n é um número inteiro que representa a ordem de difração, λ é o comprimento de onda dos raios incidentes, d é a distância interplanar (espaçamento entre planos atômicos paralelos) no cristal, θ é o ângulo de Bragg, medido entre o feixe incidente e os planos cristalográficos em consideração.

Essa equação estabelece a condição de interferência construtiva, responsável pela formação de picos de intensidade no padrão de difração. A análise do padrão angular (intensidade vs. 2θ) permite determinar informações como distâncias interplanares, parâmetros de rede, orientação preferencial (textura) e tamanho médio dos cristalitos por meio da equação de Scherrer (Cullity; Stock, 2014).

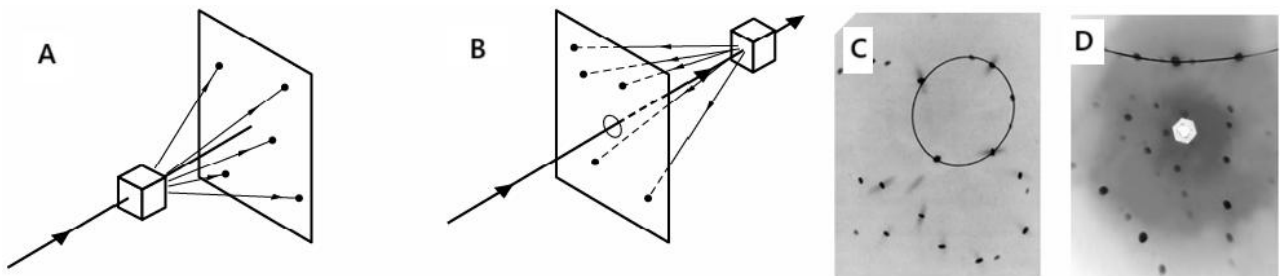
2.2.3 Métodos de Difração de Raios X

A difração pode ocorrer sempre que a lei de Bragg for satisfeita. Essa equação impõe condições rigorosas para λ e θ para qualquer cristal. Com radiação monocromática, uma configuração arbitrária de um único cristal em um feixe de raios x não produzirá, em geral, nenhum feixe difratado. Alguma maneira de satisfazer a lei de Bragg deve ser elaborada, e isso pode ser feito variando λ ou θ continuamente durante o experimento. As maneiras pelas quais essas quantidades são variáveis distinguem métodos de difração:

O método de Laue (Figura 5-A,B), que foi historicamente o primeiro método de difração de raios X a ser utilizado. Este método emprega radiação branca, ou seja, um espectro contínuo de comprimentos de onda, o que significa que o comprimento de onda λ é a variável que se ajusta durante o experimento. A amostra utilizada é um monocristal que permanece fixo na trajetória do feixe de raios X. Como o cristal está fixo, cada conjunto de planos cristalográficos possui um ângulo de Bragg θ específico em relação ao feixe incidente. Assim, a Lei de Bragg é satisfeita quando cada conjunto de planos "seleciona" e difrata um comprimento de onda específico da radiação branca incidente. Os raios difratados formam um padrão de pontos ("spots" de Laue Figura 5-C,D) em um filme fotográfico ou detector. Estas manchas, que não são arranjadas periodicamente, geralmente se alinham em curvas como elipses ou hipérbolas, dependendo da geometria

de transmissão ou retro reflexão. O método de Laue é particularmente útil para a determinação da orientação cristalográfica de monocristais e para avaliar a qualidade do cristal, visto que "spots" distorcidos podem indicar deformação.

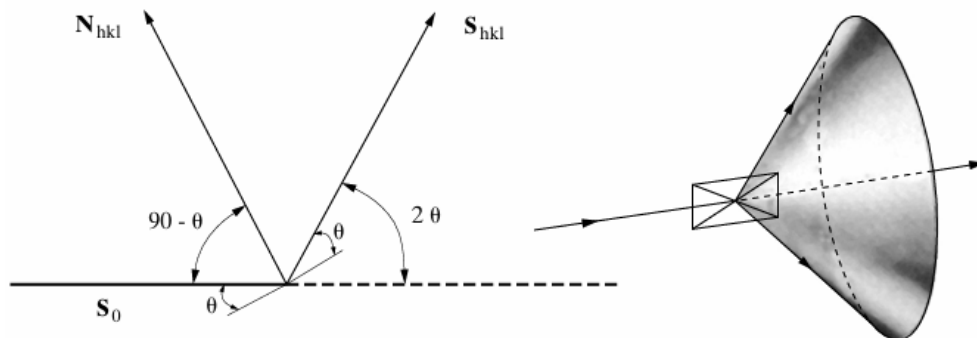
Figura 5 - A) Transmissão e B) retroflexão do método de Laue. C) Transmissão e D) Padrões de retro reflexão de Laue de um cristal de alumínio (estrutura cúbica de corpo centrado - CFC). Radiação de tungstênio, 30 kV, 19mA.



Fonte: Cullity; Stock, 2014.

O método de difração de policristais, também conhecido como método de Hull/Debye–Scherrer, é o mais amplamente utilizado em estudos de materiais, especialmente quando não se dispõe de monocristais. Ele emprega raios X quase monocromáticos. A amostra, contudo, é um material policristalino, o que significa que é composta por muitos pequenos cristais (cristalitos) orientados aleatoriamente. Devido a essa aleatoriedade, sempre haverá alguns cristalitos cujos planos atômicos estão orientados corretamente para satisfazer a Lei de Bragg para qualquer conjunto de planos e, conseqüentemente, para qualquer ângulo θ . Cada reflexão (hkl) de uma amostra policristalina estacionária produz um cone de radiação difratada (Figura 6).

Figura 6 - Formação de um cone de radiação difratada no método em pó

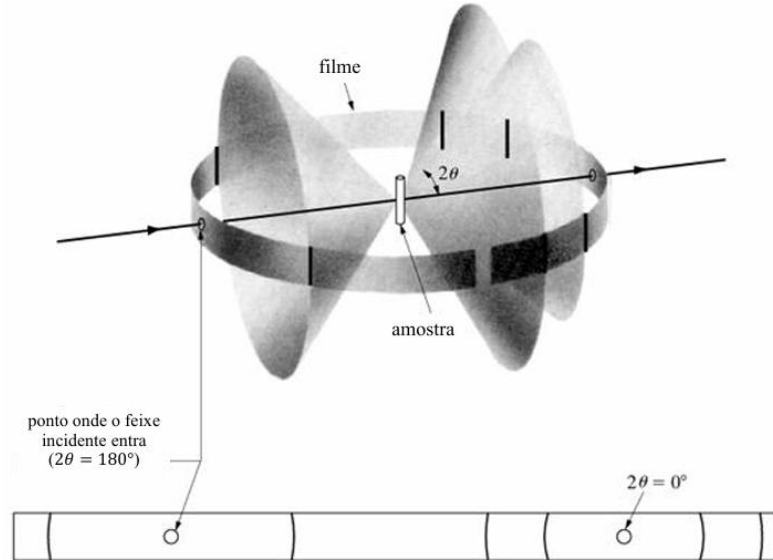


Fonte: Cullity; Stock, 2014.

Esses cones são registrados como linhas curvas em um filme (em câmeras Hull/Debye–Scherrer) (Figura 7) ou como picos de intensidade em um difratômetro que

escaneia e mede a intensidade das linhas de difração.

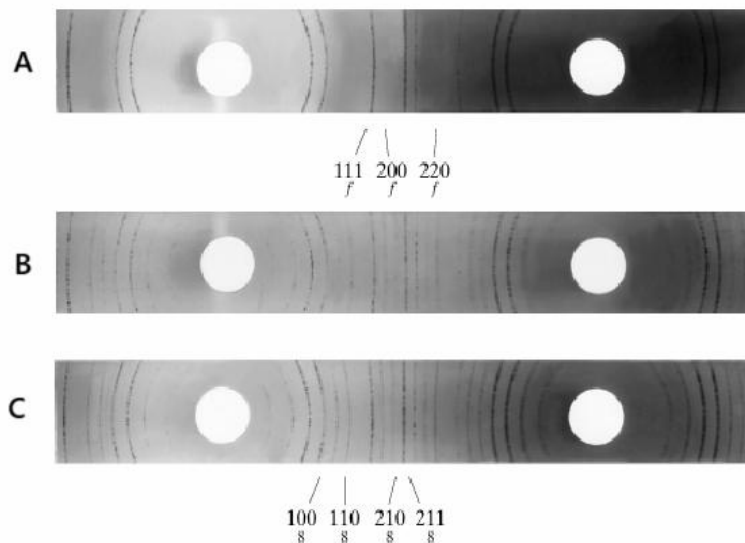
Figura 7 - Método de pó de Hull/Debye–Scherrer: Acima a relação do filme com a amostra e o feixe incidente. Abaixo a aparência do filme quando colocado plano.



Fonte: Adaptado de Cullity; Stock, 2014.

O método de difração de policristais é particularmente eficaz para a determinação precisa de parâmetros de rede e para a identificação de fases em materiais, sejam eles puros ou em misturas.

Figura 8 - Padrões de difração em pó de Hull/Debye–Scherrer de: A) cobre (CFC), B) tungstênio (estrutura cúbica de corpo centrado - CCC) e C) zinco (estrutura hexagonal compacta - HC). Radiação de cobre filtrada ($\text{CuK}\alpha$), diâmetro da câmara = 5,73 cm



Fonte: Cullity; Stock, 2014.

No padrão do cobre (Figura 8), observam-se poucos anéis bem definidos e espaçados, identificados como reflexões dos planos (111), (200) e (220), típicos da estrutura cúbica de face centrada (FCC), que possui alta simetria e poucos planos refletos únicos. O tungstênio, com estrutura cúbica de corpo centrado (BCC), apresenta mais anéis de difração do que o cobre, refletindo a presença de diferentes planos reflexivos permitidos nessa estrutura, embora não haja identificação explícita dos índices de Miller na figura. Já o zinco, com estrutura hexagonal compacta (HCP), exibe um padrão de difração com mais anéis e espaçamento menos regular, indicando uma maior diversidade de planos cristalográficos refletindo a radiação, com índices identificados como (100), (110), (210) e (211). A comparação entre os três padrões evidencia como a simetria e a geometria da célula unitária influenciam diretamente a quantidade e a posição dos anéis de difração observados, permitindo a identificação da estrutura cristalina dos materiais por meio dessa técnica.

2.3 DETECTORES DE RAIOS X E MAMOGRAFIA

A eficiência e a qualidade das imagens mamográficas são altamente influenciadas pelas características do detector utilizado. Desde a era dos filmes radiográficos, houve uma transição para tecnologias digitais que aumentaram significativamente parâmetros como resolução espacial, eficiência quântica de detecção (DQE) e capacidade de detectar microcalcificações

Um sistema de imagem por raios X tipicamente é composto por um gerador de raios X e um detector de imagem por raios X (Ou *et al.*, 2021). Tipicamente, 80% dos fótons de raios X emitidos por um gerador de diagnóstico são bremsstrahlung (Ou *et al.*, 2021). Idealmente, o ponto focal seria um ponto, eliminando o borramento geométrico, mas na prática, uma área de ponto focal finita é utilizada para permitir uma corrente de tubo suficientemente grande e um tempo de exposição curto (Bushberg *et al.*, 2011).

2.3.1 Detectores de Raios X

A imagem por raios X evoluiu significativamente desde a primeira imagem radiográfica, que foi tirada por Röntgen, mostrando claramente os ossos do dedo e o anel de sua esposa (Röntgen, 1896). Essa radiografia original demonstrou a aplicação da

tecnologia no diagnóstico médico e logo foi utilizada para identificação de jóias, coleções de arte e detecção não destrutiva de objetos metálicos na indústria (Ou *et al.*, 2021).

A evolução dos detectores de raios X inclui:

Radiografia por Filme-Tela: Os primeiros detectores fotográficos eram feitos de uma placa de vidro revestida com uma espessa camada (Ou *et al.*, 2021). O filme de raios X consiste em camadas protetora, de emulsão, adesiva e um substrato de polímero. A camada de emulsão, feita de compostos de haleto de prata misturados com gelatina, é revestida em ambos os lados para aumentar a absorção de raios X e mitigar o desfoque. No entanto, a sensibilidade da imagem de raios X é muito limitada quando a emulsão é diretamente exposta aos raios X devido à sua baixa eficiência de absorção (Ou *et al.*, 2021). Os materiais luminescentes (fósforos) como BaFBr:Eu²⁺ e CsBr:Eu²⁺ são usados na camada de fósforo, com traços de Eu²⁺ dopados para formar centros luminescentes (Ou *et al.*, 2021). Embora os sistemas de filme-tela tenham sido comprovadamente eficazes por mais de 30 anos, eles estão sendo gradualmente substituídos por tecnologias digitais (Bushberg *et al.*, 2011; Lança & Silva, 2009).

Radiografia Computadorizada (CR): Essa tecnologia utiliza placas de imagem ("image plate") que se beneficiam de fósforos com capacidade de armazenamento, como BaFBr:Eu²⁺ e CsBr:Eu²⁺ (Ou *et al.*, 2021).

Radiografia Digital (DR): Sistemas de raios X digitais, incluindo a Radiografia Computadorizada (CR) e a Radiografia Digital (DR), substituíram os sistemas de filme-tela nas últimas duas décadas (Lança & Silva, 2009). No DR, os detectores "flat panel" com grandes matrizes fotoelétricas permitem a integração de uma camada de conversão de energia de raios X e uma camada de leitura eletrônica baseada em matrizes de transistores de película fina (TFT). Ao contrário dos dispositivos de carga acoplada (CCD) que usam sistemas de lentes ópticas, os detectores "flat panel" baseados em TFT conseguem imagens de raios X de baixa dose e em tempo real. Os detectores "flat panel" podem ser categorizados em sistemas de conversão indireta e sistemas de conversão direta (Ou *et al.*, 2021).

Os principais tipos de detectores são:

Detectores Baseados em CCD: Estes surgiram em 1990 como a primeira radiografia de painel plano de grande área. Os fótons de raios X incidentes são convertidos em luminescência visível por cintiladores como CsI:Tl e GOS:Tb. A luminescência é então direcionada para a matriz de CCDs usando um sistema de lentes ópticas (Ou *et al.*, 2021).

Detectores de Conversão Indireta: Neles, os raios X são primeiro convertidos em luz visível por uma camada cintiladora, e essa luz é então capturada por uma matriz de fotodetectores. Os cintiladores mais usados são CsI:TI (com espessura de 150-600 μ m) e GOS:Tb dopado com térbio. Os cintiladores estruturados, como o CsI:TI, que consistem em "agulhas" discretas e paralelas, melhoram a resolução espacial direcionando a luminescência ao longo do cristal em forma de fibra para os fotodiodos, mitigando o espalhamento para pixels vizinhos que ocorre em cintiladores não estruturados como os cristais de pó GOS:Tb (Ou *et al.*, 2021). O iodeto de cério (CsI), com técnicas de deposição adequadas, pode formar cristais longos e colunares que atuam como tubos de luz, canalizando a luz visível emitida em seu interior para o fotocátodo com menor dispersão lateral, permitindo que o fósforo de entrada de CsI seja bastante espesso e ainda produza alta resolução (Bushberg *et al.*, 2011).

Detectores de Conversão Direta: Nestes, os raios X são convertidos diretamente em cargas elétricas que são coletadas por *arrays* pixelados, oferecendo as vantagens de alta relação sinal-ruído e alta resolução. Compostos como o selênio amorfo são usados como fotocondutores (Ou *et al.*, 2021).

Novos Materiais: O rápido desenvolvimento na ciência dos materiais está revolucionando a tecnologia de imagem por raios X (Ou *et al.*, 2021). Os materiais cintiladores, que convertem radiação de alta energia em fótons UV-Vis, são cruciais para o alto desempenho. Inicialmente, CaWO_4 e ZnS eram usados, mas após a década de 1940, cristais cintiladores como NaI:TI , CsI:TI e $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ foram gradualmente utilizados (Ou *et al.*, 2021). Mais recentemente, materiais à base de perovskita (como CsPbBr_3 nanocristais, MAPbBr_3 monocristais e perovskitas em camadas Ruddlesden-Popper) têm mostrado grande promessa para detectores de raios X devido ao seu baixo custo, tolerância a defeitos, processabilidade em solução e bandgap ajustável. No entanto, as perovskitas de haleto de chumbo enfrentam desafios de instabilidade a longo prazo e toxicidade do chumbo. Há também foco no desenvolvimento de detectores de raios X flexíveis usando materiais como fluoreto dopado com lantanídeos e cintiladores orgânicos sem metal, que são promissores para dispositivos portáteis e testes não destrutivos em condições especiais (Ou *et al.*, 2021).

2.3.2 Qualidade de Imagem e Dosimetria

A Eficiência Quântica de Detecção (DQE) é uma métrica padrão para

avaliação da qualidade da imagem em sistemas de radiografia digital. A DQE fornece a eficiência com que um detector de raios X converte a radiação incidente em sinal útil, considerando a relação sinal-ruído (SNR) e o ruído intrínseco do sistema (Ou *et al.*, 2021). Em geral, os detectores digitais apresentam DQE superior aos sistemas convencionais de filme-tela, refletindo uma maior eficácia na captação dos fótons incidentes e na produção de imagens com menor dose (Ou *et al.*, 2021).

Estudos conduzidos nos Estados Unidos indicam que a dose de radiação cumulativa para a população aumentou aproximadamente seis vezes entre 1980 e 2006, conforme dados da NCRP Report No. 160 (Bushberg *et al.*, 2011). Embora a Comissão Internacional de Proteção Radiológica (ICRP) tenha atualizado suas recomendações na Publicação 103 (2007), muitas agências reguladoras ainda fazem uso de unidades mais antigas, como o rem. Importante ressaltar que a dose efetiva (E), expressa em sievert (Sv) ou rem, é uma estimativa média populacional baseada em exposições uniformes e não deve ser usada para avaliação individual de risco em pacientes (Bushberg *et al.*, 2011).

No contexto da mamografia digital, a *Food and Drug Administration* (FDA) determina que, para fins de diagnóstico e arquivamento, a compressão de imagens deve ser obrigatoriamente sem perda. A compressão com perda é permitida apenas em visualizações secundárias, não diagnósticas (Bushberg *et al.*, 2011). Fatores de conversão baseados no tamanho do paciente também são empregados para estimar doses mais realistas e personalizadas.

2.4 PRINCÍPIOS DE FENDAS PARA RADIAÇÃO

As fendas, ou colimadores em um sentido mais amplo, são dispositivos cruciais em distintas aplicações que envolvem uso de radiação, funcionando como filtros espaciais que direcionam ou selecionam feixes de radiação específicos (Van Audenhaege *et al.*, 2015).

O princípio fundamental das fendas para radiação, ou colimadores, é permitir que apenas os fótons que viajam ao longo de trajetórias desejadas passem através de orifícios ou aberturas, enquanto bloqueiam a radiação indesejada ou desviada (Van Audenhaege *et al.*, 2015).

2.4.1 Fendas cônicas como Filtros Espaciais

Seleção de Cones de Difração: Uma fenda cônica (CS) é usada para selecionar cones de difração de pó específicos (Fioreze *et al.*, 2017). Isso significa que ela permite a passagem apenas da radiação difratada em um ângulo particular, enquanto bloqueia a radiação de outros ângulos (Obstalecki, 2011).

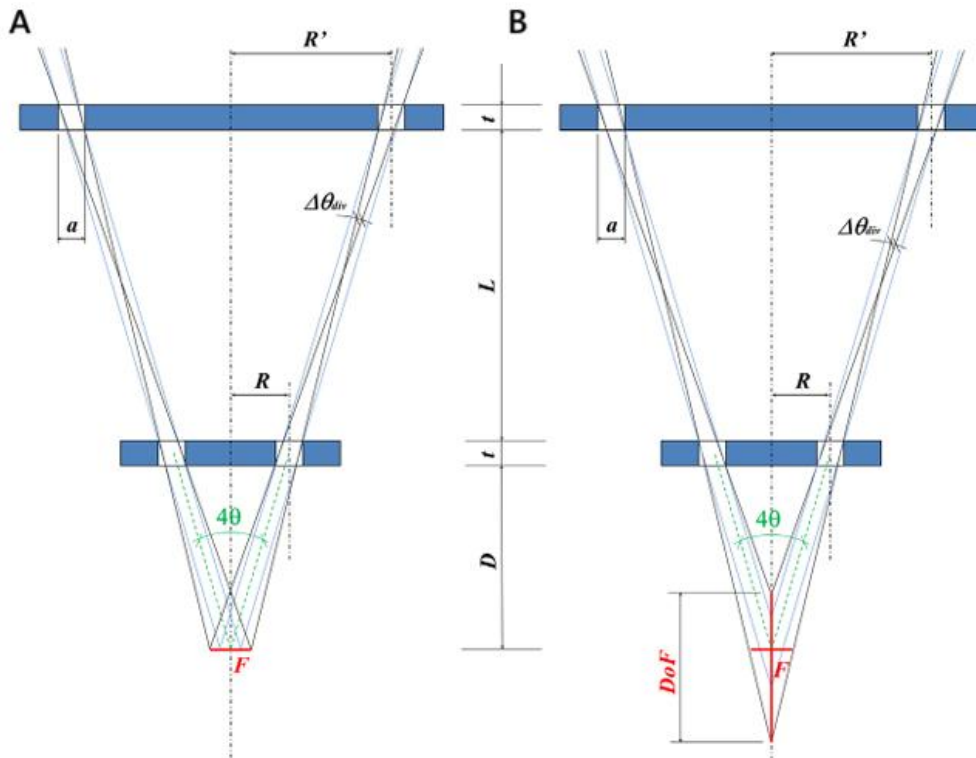
Redução de Sobreposição de Reflexões: Em experimentos onde a iluminação de uma amostra pode resultar em centenas de grãos produzindo reflexões, o que aumenta a probabilidade de sobreposição de pontos no detector, uma fenda cônica pode ser utilizada para reduzir a quantidade de reflexões presentes no detector, minimizando a chance de sobreposição de pontos (Fioreze *et al.*, 2017; Obstalecki, 2011).

A geometria cônica é projetada para otimizar a detecção de radiação difratada em um ângulo específico, o que é crucial em aplicações como a difração de raios X:

Seleção de Ângulo de Difração: O sistema de fenda cônica (CS) permite a penetração de apenas certas reflexões originadas de um volume (Fioreze *et al.*, 2017; Obstalecki, 2011).

Parâmetros Geométricos Fixos e Energia Ajustável: A fenda cônica possui parâmetros geométricos cruciais como a abertura da máscara (a), espessura da máscara (t), raio da máscara de entrada (R), raio da máscara de saída (R') e a abertura angular da CS (4θ) (Figura 9) (Fioreze *et al.*, 2017).

Figura 9 - Parâmetros geométricos da fenda cônica. (A) Representação esquemática do foco da fenda cônica (F). (B) Representação esquemática da profundidade de foco da fenda cônica (DoF).



Fonte: Fioreze *et al.*, 2017.

Cujos valores podem ser obtidos através das equações apresentadas no Quadro 2:

Quadro 2 - Equações para cálculos dos parâmetros da fenda cônica.

Distância entre amostra e fenda cônica	$D = \frac{R}{\tan\left(\frac{4\theta}{2}\right)}$
Comprimento da fenda cônica	$L = \frac{R' - R}{\tan\left(\frac{4\theta}{2}\right)}$
Divergência da fenda cônica	$\Delta\theta_{div} = 2 \left[\frac{a - t \tan\left(\frac{4\theta}{2}\right)}{L} \right]$
Foco	$F = \Delta\theta_{div} \left(D + \frac{L}{2} \right)$
Profundidade de foco	$DoF = 2 \left[\frac{F}{\tan\left(\frac{4\theta}{2} + \Delta\theta_{div}\right)} \right]$

Fonte: Adaptado de Fioreze *et al.*, 2017.

Fenda Cônica de Múltiplos Cones (MCCS): Para superar as limitações das fendas de cone único (SCCS) em ambientes com forte espalhamento de fundo, como o tecido adiposo, a fenda cônica de múltiplos cones (MCCS) foi desenvolvida. Ela é capaz de selecionar mais de um cone de difração ao mesmo tempo, incluindo cones de difração de ordem superior. Isso é particularmente útil para distinguir picos de difração de um material (como o oxalato de cálcio) do espalhamento de fundo de outros materiais (como parafina, polipropileno e poliamida) o que a SCCS não conseguia fazer eficientemente para cones de baixa ordem devido à sobreposição (Fioreze *et al.*, 2017).

2.4.2 Vantagens da fenda cônica

As vantagens da fenda cônica para raios X incluem:

- Isolamento de sinais específicos em amostras complexas: É eficaz na redução da sobreposição de reflexões quando a iluminação da amostra pode gerar múltiplos pontos de difração. Além disso, permite o isolamento de grãos individuais em materiais altamente texturizados, onde orientações similares de grãos levariam a pontos de difração sobrepostos (Fioreze *et al.*, 2017; Obstalecki, 2011).
- Detecção aprimorada em meios com espalhamento de fundo: Em contextos biomédicos, como a detecção de microcalcificações na mama, a fenda cônica de múltiplos cones (MCCS) demonstrou ser eficaz em resolver os cones de difração do oxalato de cálcio monohidratado mesmo na presença de forte espalhamento de fundo de outros materiais (Fioreze *et al.*, 2017).
- Caracterização não destrutiva e *in situ*: Embora não seja exclusiva da fenda cônica, ela contribui para a caracterização não destrutiva de elementos cristalinos no interior de amostras policristalinas, sendo adequada para experimentos *in situ* durante o processamento termomecânico (Obstalecki, 2011).

2.5 MATERIAIS SIMULADORES (FANTOMAS)

A simulação de estruturas anatômicas para imagens radiológicas é fundamental para a pesquisa científica, que visa aprofundar a compreensão da interação dos raios X com tecidos biológicos e o desenvolvimento de novas metodologias para aprimorar o diagnóstico por imagem (Oliveira, 1999). O objetivo central dos materiais equivalentes à mama é reproduzir as características de atenuação do tecido humano de

forma controlada (Poletti *et al.*, 2002).

No contexto da pesquisa, a simulação oferece uma abordagem que permite testar condições de forma mais fiel e controlar todos os parâmetros necessários para as exposições radiológicas, sem a necessidade de expor pacientes. Essa capacidade de controle é crucial para muitos contextos, inclusive na comprovação da importância da simulação para o aprimoramento de técnicas de processamento de imagens, como a modificação da técnica de aquisição para reduzir o ruído de fundo nas mamografias e facilitar a detecção de microcalcificações (Oliveira, 1999).

Diversos materiais são utilizados como simuladores de mama em estudos científicos, buscando replicar as propriedades dos tecidos biológicos (Oliveira, 1999; Poletti *et al.*, 2002):

- Polimetilmetacrilato (PMMA), nylon e polietileno. São materiais plásticos ou resinas epóxi, escolhidos por sua estabilidade e capacidade de serem moldados (Poletti *et al.*, 2002).
- Lucite (nome comercial para o PMMA) e alumínio (Oliveira, 1999).
- Água, frequentemente usada como referência para tecidos moles (Poletti *et al.*, 2002).
- Materiais comerciais equivalentes à mama, como os da *Computerized Imaging Reference System, Inc.* (CIRS) e *Radiation Measurements Inc.* (RMI), que simulam diferentes proporções de tecido glandular e adiposo, sendo avaliados em pesquisa para determinar sua fidelidade aos tecidos humanos (Poletti *et al.*, 2002).

Pesquisas sobre perfis de espalhamento, como as de Poletti *et al.* (2002), classificam os materiais em três grupos com base em suas características de espalhamento, fornecendo informações críticas para a seleção e desenvolvimento de materiais em pesquisa:

- Materiais amorfos: Incluem água, PMMA e tecidos mamários (adiposo e glandular), caracterizados por não apresentarem picos nítidos em seus padrões de espalhamento.
- Materiais poliméricos: Representados pelos materiais comerciais CIRS e RMI, que exibem um comportamento intermediário entre estruturas amorfas e cristalinas.
- Materiais semicristalinos: Como o nylon e o polietileno, que apresentam picos bem definidos, indicando uma estrutura mais ordenada.

Os estudos frequentemente comparam as propriedades de materiais com o tecido adiposo e tecido adiposo animal. O tecido adiposo mamário pode ser bem simulado por materiais equivalentes à mama comerciais, como os da CIRS ou RMI. A amostra RMI, por exemplo, demonstrou ser equivalente a tecido adiposo e água. O perfil de espalhamento do tecido adiposo difere do perfil do tecido glandular, apresentando um pico principal em valores de x mais baixos e mais estreitos, o que é atribuído à organização de camadas de células de gordura (Poletti *et al.*, 2002).

Para além dos materiais que simulam o tecido adiposo, outros têm sido extensivamente avaliados:

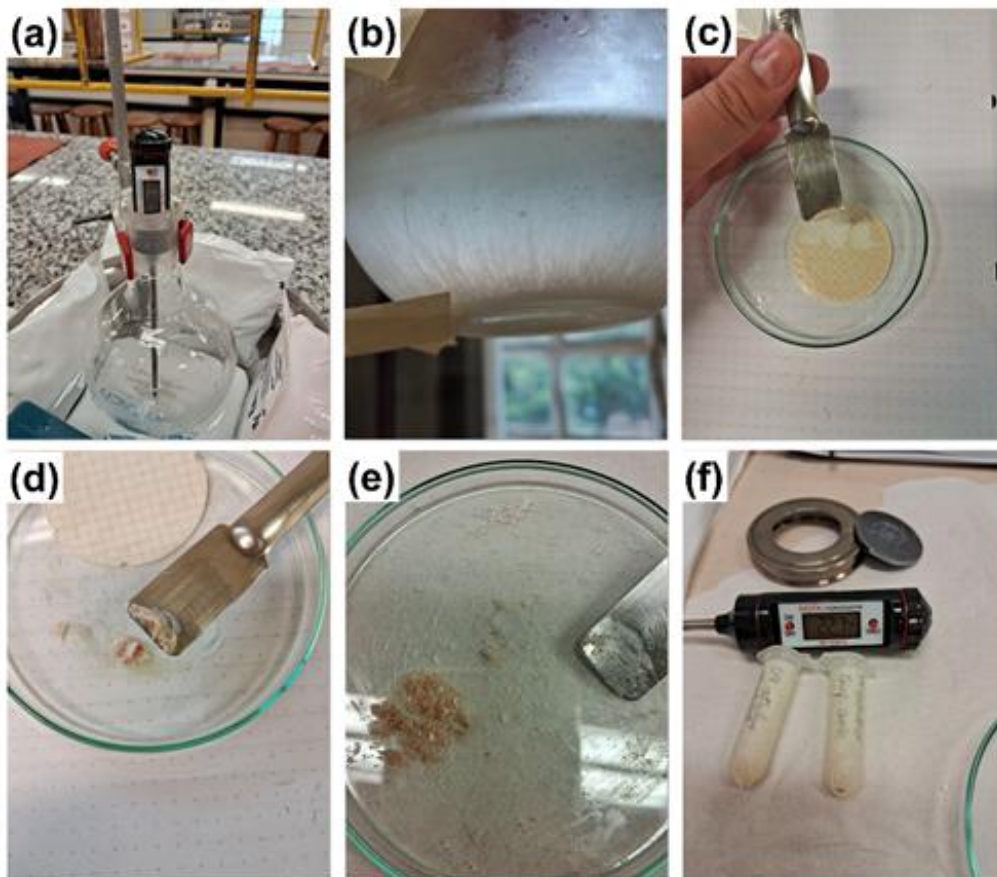
- O PMMA é amplamente utilizado em programas de acreditação (Oliveira, 1999), mas é um mau simulador para o tecido adiposo em termos de seu perfil de espalhamento (Poletti *et al.*, 2002).
- O tecido glandular é mais bem simulado pela água, enquanto os materiais comerciais testados (CIRS e RMI) não são adequados para simulá-lo. O perfil de espalhamento do tecido glandular é similar ao da água (Poletti *et al.*, 2002).
- Tecidos reais de mastectomia foram empregados para construir simuladores em pesquisa, permitindo o estudo da detectabilidade de lesões e microcalcificações em diferentes proporções de tecidos adiposos e fibrosos (Oliveira, 1999).

A pesquisa com fantasmas e simuladores tem como objetivo final a transferência e aplicação de seus resultados para o ambiente clínico. O propósito é aprimorar o diagnóstico e o tratamento, garantindo a segurança do paciente (Oliveira, 1999). A validação dos modelos simulados é, em última instância, realizada pela comparação com imagens reais obtidas em mamografias clínicas (Oliveira, 1999).

3 METODOLOGIA

Para testar a fenda cônica impressa em 3D, primeiro sintetizamos amostras de oxalato de cálcio duplamente hidratado (OCDH – fase weddelita) com base na metodologia de LePage & Tawashi (1982), (Figura 10).

Figura 10 - Alguns passos da síntese do oxalato de cálcio duplamente hidratado (OCDH). a) Controle de temperatura para adicionar oxalato de sódio ao cloreto de cálcio. b) Cristalização, após 24 horas, em uma solução sem agitação. c) OCDH no filtro. d)-e) OCDH removido do filtro. f) Amostras de OCDH prontas para análise.



Fonte: adaptado de Benedet *et al.*, 2025.

No total, seis amostras foram sintetizadas. Em seguida, as amostras de OCDH foram analisadas por difração de raios X (DRX) e espectroscopia de raios X por dispersão de energia (EDS), juntamente com imagens e resultados da microscopia eletrônica de varredura (MEV). Além disso, a banha de porco comercial também foi caracterizada por DRX.

Para as medidas de MEV/EDS, as amostras policristalinas de OCDH foram espalhadas em uma fita de carbono (10 x 10 mm²) e fixadas na câmara de vácuo do microscópio eletrônico de varredura da UNILA com voltagem de aceleração de 10 kV e

ampliação de 5000x.

Para as medidas de DRX, as amostras policristalinas de OCDH foram distribuídas em porta-amostras de fundo zero de Si (diâmetro de 15 mm e espessura de 0,5 mm) e a amostra de banha de porco comercial foi colocada em outro porta-amostras (diâmetro de ~30 mm e espessura de 2 mm). As medidas DRX foram adquiridas com um tubo de raios X de alvo de Cu operando em 40 kV x 20 mA com filtro de Ni ($\text{CuK}\alpha$ - 1,542 Å) no difratômetro multiusuário da UNILA.

A fenda cônica foi projetada no Software Autodesk Inventor (Autodesk, 2024) a partir dos parâmetros geométricos para radiação $\text{MoK}\alpha$ (~0,711 Å) e os cinco picos de difração de maior intensidade do padrão de difração do OCDH, utilizando as equações apresentadas no Quadro 2, torna-se possível obter os parâmetros apresentados nas Tabelas 1 e 2.

Tabela 1 - Parâmetros da fenda cônica impressa em 3D para $\text{MoK}\alpha$ (~0.711 Å) oxalato de cálcio di-hidratado (weddelita): a é a abertura da máscara, t é a espessura da máscara, R é o raio de entrada da máscara, R' é o raio de saída da máscara e 4θ é a abertura angular.

Cone de difração	a (mm)	t (mm)	R (mm)	R' (mm)	4θ (graus)
1	1,00	1,00	4,65	13,3	13,2
2	1,00	1,00	6,50	18,7	18,5
3	1,00	1,00	10,5	30,1	29,4
4	1,00	1,00	13,2	38,0	36,5
5	1,00	1,00	15,8	45,5	43,1

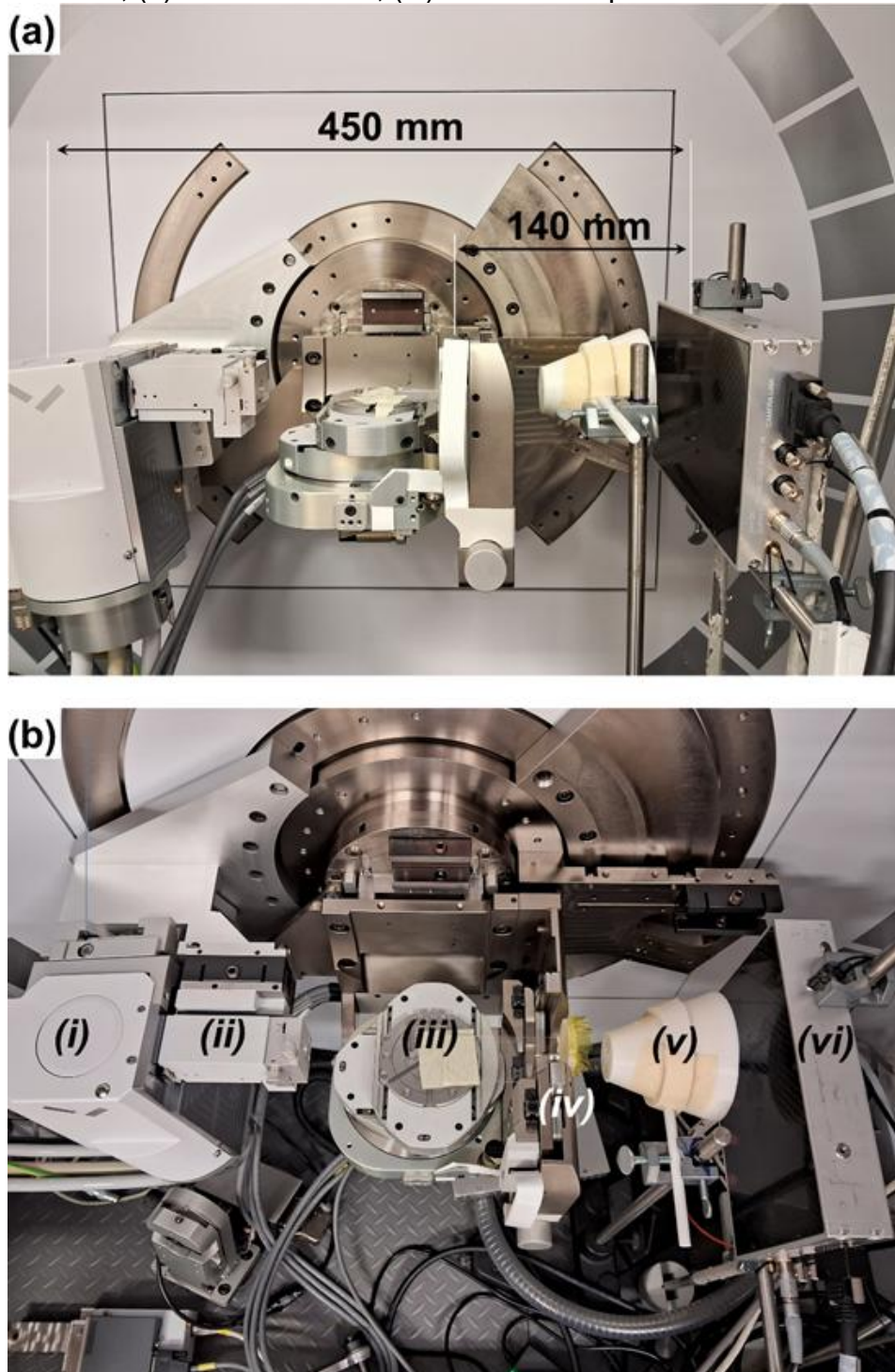
Tabela 2 - Parâmetros da fenda cônica impressa em 3D para $\text{MoK}\alpha$ (~0.711 Å): D é a distância da amostra até a máscara de entrada, L é o comprimento da fenda, $\Delta\theta_{div}$ são as divergências da fenda cônica para cada cone de difração, F é o foco e DoF é a profundidade de foco.

Cone de difração	D (mm)	L (mm)	$\Delta\theta_{div}$ (graus)	F (mm)	DoF (mm)
1	40,6	75,0	1,35	1,84	13,2
2	39,9	75,0	1,28	1,73	9,31
3	40,0	75,0	1,13	1,53	5,26
4	40,0	75,0	1,02	1,38	3,95
5	40,0	75,0	0,924	1,25	3,02

Em seguida, a fenda foi impressa em uma impressora 3D Prusa MK2S de hardware aberto com ácido polilático (PLA), padrão de preenchimento tipo “grid” (grade) com 42% de preenchimento e espessura de camada de 150 μm .

Para os testes com a fenda cônica, o experimento foi montado no difratômetro multiusuário da UNILA, como mostra a Figura 11.

Figura 11 - Experimento montado no difratômetro multiusuário da UNILA, para testes da fenda cônica impressa em 3D. (a) Vista lateral enfatizando as distâncias da fonte ao detector e da amostra ao detector; (b) Vista superior mostrando: (i) tubo de raios X (alvo de Mo em geometria foco ponto); (ii) colimador (fendas cruzadas); (iii) estágio multi-eixos, para fixação da amostra; (iv) amostra; (v) fenda cônica e; (vi) detector flat panel.



Fonte: adaptado de Benedet *et al.*, 2025.

Uma amostra policristalina de OCDH com melhor cristalinidade foi selecionada, ou seja, aquela com intensidades de picos de difração mais altas e perfis de difração angulares mais estreitos. Em seguida, a amostra policristalina de OCDH (~0,5 mm de espessura) foi montada em uma moldura de polipropileno (diâmetro de ~1 polegada) com janelas de poliamida de 7,5 μm de espessura. As amostras de gordura de porco comercial foram montadas da mesma forma, no entanto, com uma espessura de 3 mm. As amostras foram então fixadas no estágio multi-eixos do difratômetro multiusuário da UNILA, para facilitar o alinhamento com o feixe incidente de raios X.

Após isso, a fenda cônica foi posicionada entre a amostra e o detector. As imagens de raios X (projeções dos cones de difração) foram adquiridas com fonte de raios X de Mo operando em 40 kV, com correntes variando entre 20 mA e 30 mA. Um filtro de Zr também foi adicionado com vistas a monocromatizar o feixe ($\text{MoK}\alpha - 0,711 \text{ \AA}$). Os tempos de exposição variaram de 5 s a 10 s. O feixe de raios X que incidia sobre a amostra foi delimitado por um colimador de fenda cruzada [150 mm de comprimento com fendas de colimação de 0,4 (H) \times 1,2 (V) mm^2].

As imagens foram analisadas com o objetivo de extrair perfis radiais de intensidade que representassem a distribuição da radiação espalhada pelas amostras. Para isso, utilizou-se o *software* ImageJ (Schneider; Rasband; Eliceiri, 2012). As regiões de interesse foram definidas como anéis concêntricos ao redor do feixe direto. A partir dessas regiões, foram extraídos os perfis radiais de intensidade por meio da ferramenta "Radial Profile" do ImageJ que calcula a média da intensidade dos pixels ao longo dos raios circulares centrados na imagem.

Para fins de comparação entre as imagens adquiridas com diferentes configurações, as intensidades extraídas foram corrigidas de acordo com a corrente do tubo de raios X (em mA) e o tempo de exposição (em segundos). A intensidade corrigida foi calculada pela seguinte expressão:

$$I = \frac{I_{rad}}{\text{tempo} * \text{corrente}}$$

Onde I_{rad} é o valor de intensidade retirada da imagem pelo perfil radial.

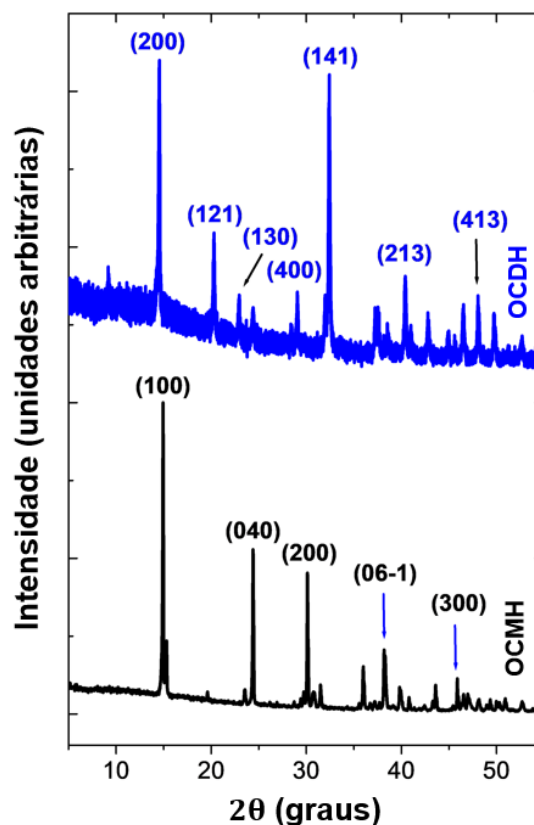
Por fim, os perfis corrigidos foram normalizados em relação à intensidade máxima obtida para a amostra de OCDH, resultando em valores de intensidade relativa I/I_0 , onde I_0 representa a intensidade máxima registrada para a amostra de OCDH. Essa normalização facilita a comparação qualitativa e quantitativa entre os diferentes perfis extraídos.

4 RESULTADOS E CONCLUSÕES

O OCDH é termodinamicamente instável, porém, cineticamente favorável. Então, de acordo com a literatura, o OCDH pode manter suas propriedades se mantido a baixas temperaturas (~ 4 °C). Monitoramos durante 50 semanas por DRX e EDS/MEV nossas amostras de OCDH sintetizadas. As amostras de OCDH foram armazenadas a ~ 3 °C e foram retiradas do armazenamento apenas para medidas. Nessas condições, nenhuma alteração foi observada.

Os resultados de DRX para a amostra de pó de OCDH com melhor cristalinidade e para uma amostra comercial de oxalato de cálcio mono hidratado (OCMH) são mostrados na Figura 12.

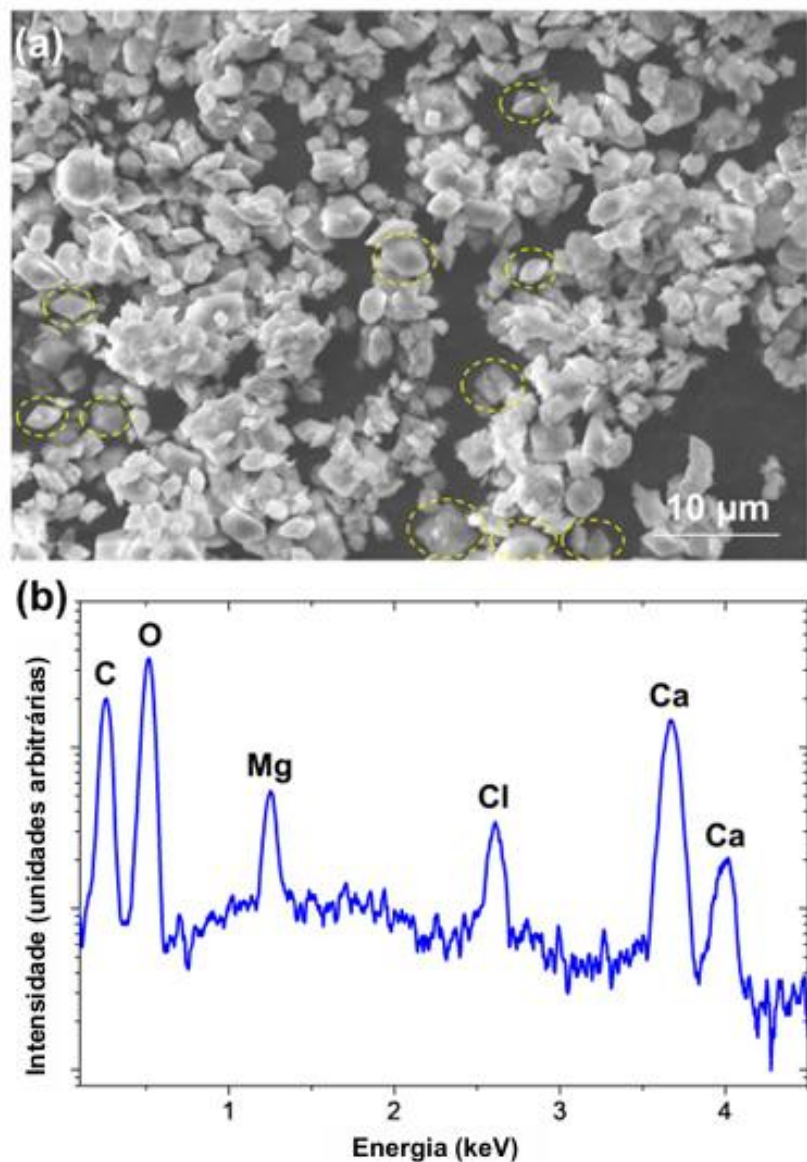
Figura 12 - Resultados de difração de raios X obtidos com radiação $\text{CuK}\alpha$ ($\sim 1,542$ Å). Em azul, o difratograma do oxalato de cálcio duplamente hidratado [OCDH - ICSD 030783 - fase weddelita - $\text{CaC}_2\text{O}_4(\text{H}_2\text{O})_2,375$] que foi sintetizado, resultado de 50 semanas após síntese, porém mantido a ~ 3 °C. Em preto, o difratograma do oxalato de cálcio monohidratado comercial e termodinamicamente estável [OCMH – ICSD 158939 - fase whewellita - $\text{CaC}_2\text{O}_4\text{H}_2\text{O}$]. As indexações ICSD foram estabelecidas com base nos índices de Miller indicados nos difratogramas.



Fonte: adaptado de Benedet *et al.*, 2025.

Análises EDS/MEV foram realizadas para caracterizar o OCDH em termos de forma cristalina e composição química (Figura 13).

Figura 13 - (a) Microscopia eletrônica de varredura (MEV) do OCDH sintetizado. (b) Espectroscopia de raios X por dispersão de energia (EDS) do OCDH sintetizado, obtida na mesma amostra mostrada em (a).



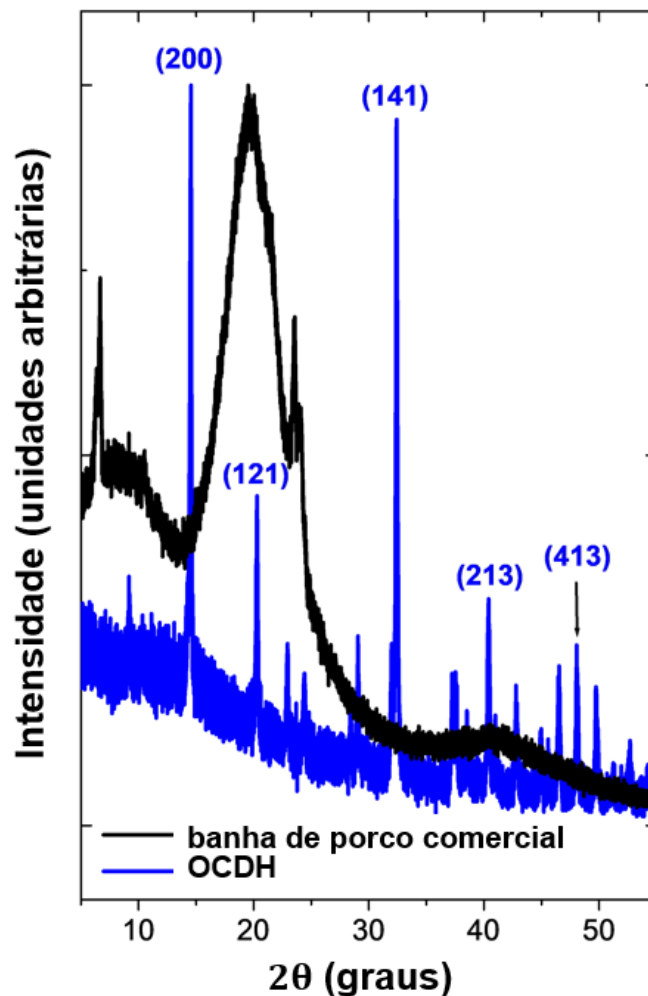
Fonte: adaptado de Benedet *et al.*, 2025.

Como esperado, traços de cálcio (Ca), carbono (C) e oxigênio (O) foram encontrados nos resultados de EDS (Figura 13b). No entanto, traços de magnésio (Mg) e cloro (Cl) também foram encontrados. O Mg pode ser atribuído a alguma contaminação no processo de síntese, já o Cl é atribuído ao cloreto de cálcio também utilizado no processo de síntese. Ambos podem contribuir para comprometer a qualidade cristalina do OCDH. A imagem MEV (Figura 13a) mostra algumas formas de prisma retangulares com cristais de

base quadrada, que é uma forma típica de cristais tetragonais que é a estrutura cristalina do OCDH, conforme previamente indexado por medidas de DRX.

O DRX para a banha de porco comercial também foi medido. Os resultados estão mostrados na Figura 14 onde somente os picos de difração do OCDH selecionados pela fenda cônica (cinco ao todo) estão indicados com índices de Miller.

Figura 14 - Difractogramas da banha de porco comercial e OCDH, obtidos com radiação $\text{CuK}\alpha$ ($\sim 1,542 \text{ \AA}$), destacando os picos de difração selecionados (mais intensos), usados para o projeto de fenda cônica impressa em 3D.

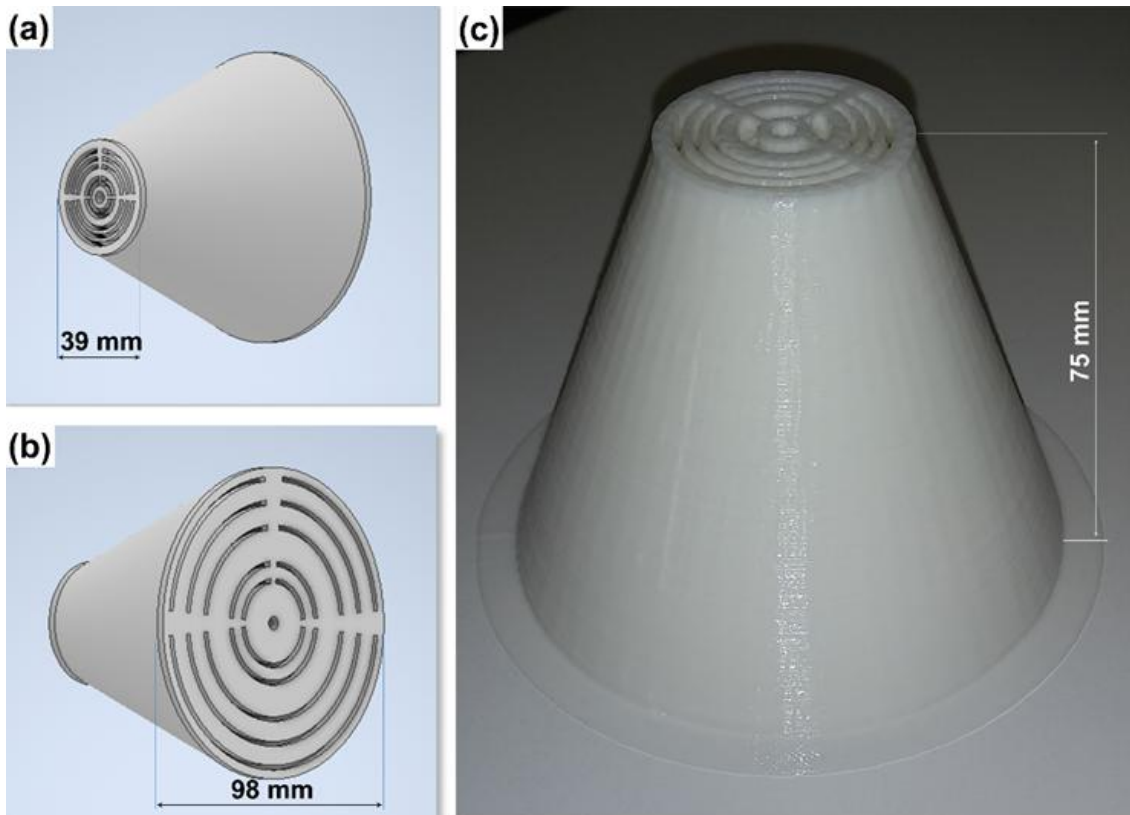


Fonte: adaptado de Benedet *et al.*, 2025.

Os picos de difração (200) e (121) do OCDH são fortemente afetados pelo pico de difração principal (espalhamento) da banha de porco comercial. Assim, devido à sobreposição desses sinais, nesta região angular, a fenda cônica não é eficiente, funcionará apenas para picos de difração de ordem superior.

A fenda cônica foi projetada conforme mencionado na seção anterior (Figura 15 a/b) e o resultado da impressão está mostrado na Figura 15 c.

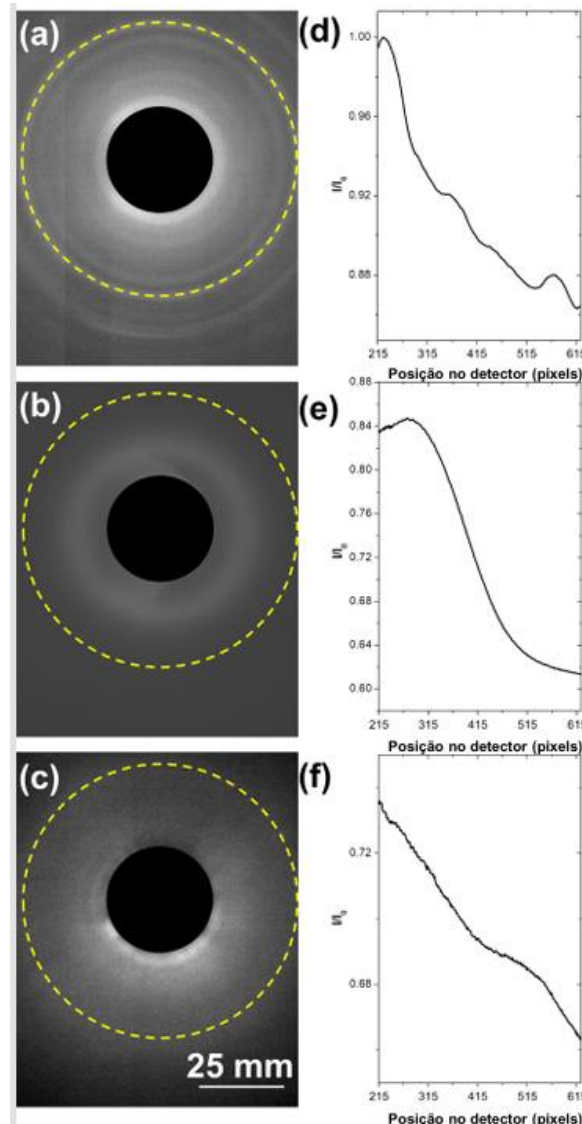
Figura 15 - Design de fenda cônica: (a) Observando a máscara de entrada e (b) observando a máscara de saída; (c) impressão 3D em ácido polilático (PLA). Os outros parâmetros da fenda, para MoK α ($\sim 0,711$ Å), encontram-se nas Tabelas 1 e 2.



Fonte: adaptado de Benedet *et al.*, 2025.

Antes de testar os conjuntos amostras/fenda, foram feitas imagens da difração das amostras (OCDH e banha de porco comercial) sem a fenda. O alinhamento foi feito de tal forma que as projeções do cone de difração no detector 2D estão distribuídas simetricamente em torno do feixe de raios X incidente, ocultado por um *beam stop*. Os resultados desta etapa estão apresentados na Figura 16.

Figura 16 - Imagens projetadas da difração de (a) OCDH e (b) banha de porco comercial, com $\text{MoK}\alpha$ ($\sim 0,711 \text{ \AA}$) e o detector *flat panel*, sem a fenda cônica impressa em 3D. Para comparações de padrões de dispersão, uma imagem com a fenda tirada com os mesmos parâmetros de (a) e (b) (sem as amostras), é mostrada em (c). Os perfis radiais das imagens, tiradas nas áreas limitadas pelos círculos tracejados nas imagens (a-c), são mostrados em (d-f), respectivamente. I_0 é a intensidade máxima para o DHCO.



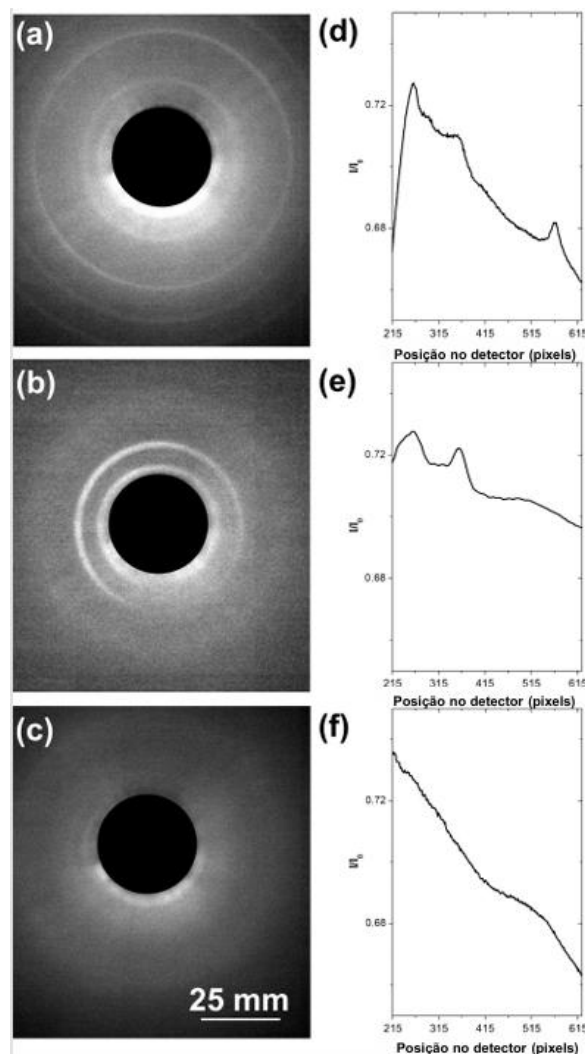
Fonte: adaptado de Benedet *et al.*, 2025.

Como já observado nas medidas de DRX da Figura 14, a principal projeção do cone de difração (espalhamento) da banha de porco comercial coincide com a primeira projeção do cone de OCDH (Figuras 16a e 16b). No entanto, o sinal de espalhamento é menor (Figuras 16d e 16e). Assim, se ambas as amostras forem combinadas, provavelmente o sinal de OCDH (difração) será distinguido, especialmente para a difração de ordem mais alta. A fenda cônica ajudará a reduzir o ruído de fundo, já que o próprio espalhamento de raios X da fenda (Figuras 16c e 16f) é menor do que a

difração/espalhamento de OCDH e da banha de porco comercial.

Com o conjunto amostras/fenda, também foram feitas imagens da difração das amostras (OCDH e banha de porco comercial). Os resultados estão apresentados na Figura 17.

Figura 17 - Imagens projetadas dos cones de difração/espalhamento de (a) OCDH e (b) banha de porco comercial, obtidas com $\text{MoK}\alpha$ ($\sim 0,711 \text{ \AA}$), a fenda cônica impressa em 3D e o detector plano bidimensional. Para comparações de padrões de espalhamento, (c) é mostrada uma imagem com a fenda obtida com os mesmos parâmetros de (a) e (b) (sem as amostras). Os perfis radiais das imagens (a-c) são mostrados em (d-f), respectivamente. I_0 é a intensidade máxima para o OCDH sem a fenda cônica.



Fonte: adaptado de Benedet *et al.*, 2025.

É fácil observar, ao comparar as Figuras 16a e 17a, que com a fenda cônica impressa os cones de projeção do OCDH estão mais definidos. No entanto, nota-se, ao olhar para as Figuras 17b e 17e, que a difração/espalhamento da gordura de porco comercial também passa pelas primeiras e segundas aberturas da fenda impressa. Isso já

era esperado pelos resultados de DRX mostrados na Figura 14.

O espalhamento da gordura de porco comercial se propaga pela fenda cônica impressa, aumentando homogeneamente o espalhamento em ângulos maiores (valores de pixel mais altos na Figura 17e). Com certeza, isso pode mascarar os cones de difração de ordem superior do OCDH. Mesmo a amostra de gordura de porco comercial sendo muito mais espessa do que a amostra de OCDH (~3,0 mm e ~0,5 mm, respectivamente), isso não era esperado. Como pode ser visto nas Figuras 16d e 16e, o sinal de OCDH é mais forte do que o sinal da gordura de porco comercial. Portanto, provavelmente, a radiação espalhada da gordura de porco comercial tem energia suficiente para passar por toda a fenda.

Melhorias na fenda cônica impressa em 3D são necessárias. As soluções para isso são, por exemplo: i) cobrir as máscaras de entrada e saída da fenda cônica com lâminas de chumbo; ii) aumentar a densidade de preenchimento da fenda cônica (ou, até mesmo, dopar o PLA com algum elemento químico mais pesado, por exemplo, o óxido de ferro); iii) aumentar o comprimento da fenda cônica e; iv) reduzir a tensão de operação (por exemplo, 30 kV), a fim de reduzir a penetrabilidade da radiação de freamento (*bremstrahlung*).

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

A Fenda cônica foi fabricada por impressão 3D e testada para detecção da difração de oxalato de cálcio duplamente hidratado. Para isso, o oxalato de cálcio duplamente hidratado (OCDH - fase weddelita) foi sintetizado e caracterizado quimicamente e estruturalmente. Testes de imagem de difração [cones de difração projetados em um detector bidimensional (2D)] com e sem a fenda cônica foram realizados com OCDH e gordura de porco comercial (que representa, de forma muito simplificada, o tecido adiposo). Os resultados mostraram que a fenda cônica impressa é capaz de melhorar o sinal de difração projetados do OCDH. No entanto, parece que o espalhamento do feixe de raios X pela gordura de porco comercial passa por toda a fenda e pode mascarar o sinal do OCDH. Portanto, melhorias na fenda cônica são necessárias e são sugestões para trabalhos futuros. Cobrir as máscaras de entrada e saída da fenda cônica com lâminas de chumbo, aumentar da densidade de impressão 3D ou mesmo dopar do PLA com algum material mais denso, aumentar o comprimento da fenda e reduzir da tensão de operação do tubo de raios X (por exemplo, 30 kV) para reduzir a penetrabilidade da radiação, são algumas das sugestões.

6 EVENTOS E PUBLICAÇÕES

Ao longo do desenvolvimento deste trabalho, os resultados foram apresentados em eventos científicos, tanto nacionais quanto internacionais. Essas participações permitiram a troca de experiências com outros pesquisadores da área e o recebimento de sugestões construtivas.

Entre os eventos dos quais participei apresentando a pesquisa, destacam-se a 26ª Reunião da Associação Brasileira de Cristalografia (ABCr) na USP de Ribeirão Preto em novembro de 2023, e o XVII *Latin American Seminar of Analysis by X-ray Techniques* – SARX na UERJ em novembro 2024.

Além das apresentações em eventos, os resultados foram submetidos ao periódico internacional *X-Ray Spectrometry*, com aceite para publicação em julho de 2025, o artigo intitulado “*3D printed conical slits for seeking calcium spots among different tissue-equivalent materials*” encontra-se atualmente em processo de editoração e estará disponível em breve.

REFERÊNCIAS

- INCA – Instituto Nacional de Câncer. **Estimativa 2023: incidência de câncer no Brasil**. Rio de Janeiro: INCA, 2023.
- CHINYAMA, C. N. **Benign Breast Diseases: Radiology – Pathology – Risk Assessment**. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004
- SANTOS, R. O. M. et al. Risco de resultado falso positivo no rastreamento mamográfico do Brasil. **Cadernos de Saúde Pública**, v. 39, n. 5, e00117922, 2023. DOI: 10.1590/0102-311XPT117922.
- WILLEKENS, I. et al. High-resolution 3D micro-CT imaging of breast microcalcifications: a preliminary analysis. **BMC Cancer**, London, v. 14, n. 9, p. 1–9, jan. 2014. DOI: 10.1186/1471-2407-14-9.
- FRAPPART, L. et al. Structure and composition of microcalcifications in benign and malignant lesions of the breast: study by light microscopy, transmission and scanning electron microscopy, microprobe analysis, and X-ray diffraction. **Human Pathology**, Philadelphia, v. 15, n. 9, p. 880–889, set. 1984. DOI: 10.1016/S0046-8177(84)80150-1.
- FIOREZE, M. et al. Conical slit and conventional X-ray sources: challenging steps for calcium spots detection. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A**, Amsterdam, v. 867, p. 171–181, set. 2017.
- SICKLES, E. A. Breast calcifications: mammographic evaluation. **Radiologic Clinics of North America**, Philadelphia, v. 24, n. 1, p. 95–106, jan. 1986.
- O'GRADY, S.; MORGAN, M. P. Microcalcifications in breast cancer: From pathophysiology to diagnosis and prognosis. **Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Reviews on Cancer**, Amsterdam, v. 1869, n. 2, p. 310–320, 2018.
- PISANO, E. D. *et al.* Diagnostic performance of digital versus film mammography for breast-cancer screening. **New England Journal of Medicine**, Boston, v. 353, n. 17, p. 1773–1783, out. 2005.
- TAZZOLI, V.; DOMENEGHETTI, C. The crystal structures of whewellite and weddellite: re-examination and comparison. **American Mineralogist**, Washington, v. 65, n. 3-4, p. 327–334, 1980.
- SHIN, H. J. *et al.* BI-RADS descriptors for mammographically detected microcalcifications verified by histopathology after needle-localized open breast biopsy. **American Journal of Roentgenology**, Saint Louis, v. 195, n. 6, p. 1466–1471, dez. 2010.
- FUSHIMI, A. *et al.* Features of Microcalcifications on Screening Mammography in Young Women. **Asian Pacific Journal of Cancer Prevention**, v. 19, n. 12, p. 3591-3596, 2018.
- OBENAUER, S. *et al.* Impact of breast density on computer-aided detection in full-field digital mammography. **Journal of Digital Imaging**, New York, v. 19, n. 3, p. 258–263, set. 2006.
- LOGULLO, A. *et al.* Breast microcalcifications: Past, Present and Future (Review). **Molecular and Clinical Oncology**, v. 16, n. 4, 10 fev. 2022.

VALIDO, I. H. et al. Characterization of Calcium Oxalate Hydrates and the Transformation Process. **ChemPhysChem**, v. 21, n. 22, p. 2583–2593, 23 out. 2020.

HAKA, A S. et al. Identifying microcalcifications in benign and malignant breast lesions by probing differences in their chemical composition using Raman spectroscopy. **Cancer Res.** 2002 Sep 15;62(18):5375-80. PMID: 12235010.

BAKER, R. et al. New relationships between breast microcalcifications and cancer. **British Journal of Cancer**, London, v. 103, n. 7, p. 1034–1039, 2010. DOI: 10.1038/sj.bjc.6605873.

SCOTT, R. et al. Relationships between pathology and crystal structure in breast calcifications: an in situ X-ray diffraction study in histological sections. **npj Breast Cancer**, v. 2, n. 1, 14 set. 2016.

LEPAGE, L.; R. TAWASHI. Growth and Characterization of Calcium Oxalate Dihydrate Crystals (Weddellite). **Journal of Pharmaceutical Sciences**, v. 71, n. 9, p. 1059–1062, 1 set. 1982.

CULLITY, B. D.; STOCK, S. R. **Elements of X-ray diffraction**. 3 edição. Essex: Pearson Education Limited, 2014

RÖNTGEN, W. C. On a New Kind of Rays. **Nature**, London, v. 53, n. 1369, p. 274–276, 1896. DOI: 10.1038/053274b0.

OU, X. et al. Recent Development in X-Ray Imaging Technology: Future and Challenges. **Research**, v. 2021, n. 9892152, p. 1–18, 26 dez. 2021.

BUSHBERG, J. T. **The essential physics of medical imaging**. Philadelphia: Wolters Kluwer Health/Lippincott Williams & Wilkins, 2012.

VAN AUDENHAEGE, K. et al. Review of SPECT collimator selection, optimization, and fabrication for clinical and preclinical imaging. **Medical Physics**, v. 42, n. 8, p. 4796–4813, 1 ago. 2015.

OBSTALECKI, M. Thesis: In situ measurement of lattice strain using synchrotron radiation and a conical slit system. University of Illinois at Urbana-Champaign, 2011.

OLIVEIRA, H. J. Q. de. Tese: Simulação de estruturas anatômicas e imagens radiológicas para controle de qualidade e processamento. Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1999.

POLETTI, M. E.; O.D. GONÇALVES; MAZZARO, I. X-ray scattering from human breast tissues and breast-equivalent materials. **Physics in Medicine and Biology**, v. 47, n. 1, p. 47–63, 2002.

SCHNEIDER, C. A., RASBAND, W. S., ELICEIRI, K. W. (2012). NIH Image to ImageJ: 25 years of image analysis. **Nature Methods**, 9(7), 671–675. doi:10.1038/nmeth.2089

AUTODESK. **Inventor Professional: versão estudantil** [programa de computador]. Versão 2024. San Rafael, CA: Autodesk Inc., 2023.

BENEDET, R. O. et al. 3D printed conical slits for seeking calcium spots among different tissue-equivalent materials. **X-Ray Spectrometry**. Artigo aceito para publicação, jul. 2025. DOI: 10.1002/xrs.70014