

日本原子力研究開発機構 量子ビーム応用研究部門 照射細胞解析研究グループ 森林健悟



重粒子線の特徴



放射線によるDNA損傷: 原子分子過程の役割

放射線:最初に生体の主成分の水 と相互作用:二次電子発生



ラジカル(OH)の生成過程 H₂O+e⁻→ (H₂O)*+e⁻ ↓ H+OH

(H₂O)*:水の電子励起状態

図 2-10. DNA がうける X 線あるいは y 線に よる直接作用と間接作用

直接作用では,光子の吸引によって飛び出した 二次電子とDNA分子との直接的な相互作用に よってDNAに損傷を生じる.間接作用では,飛 び出した二次電子が水分子と反応し,ラジカル を形成し,ラジカルがDNA分子を傷つける.半 径2mm以内に生じたラジカルがDNAを攻撃 できると推定される.

(Eric J. Hall Radiobiology for the Radiologist 5th Edition, Lippincott Williams & Wilkins 2000 年 Philadelphia, PA, USA より改変)

「放射線生物学」(改訂4版)、著者: 増田康治、南山堂、16ページ

重粒子線照射とクラスターDNA損傷



※1nm(ナノメートル)=10⁻⁹m

J.F. Ward, Int. J. Radiat. Biol. **66**, 427 (1994). D.T. Goodhead, Int. J. Radiat. Biol. **65**, 7(1994).

研究のねらい

<mark>クラスターDNA損傷</mark>:RBEを説明する唯一の仮説。

クラスターDNA損傷生成過程など不明な点多い

(N. Shikazono, et al., J. Radiat. Res. **50**, 27 (2009)).

トラック構造のシミュレーション不可欠!

(二次電子の運動が重要な働き)





チャタジーモデルとリンドハードモデル (自由電子ガスモデル)

チャタジーモデルはリンドハードの自由電子ガスモデルを一般の 物質に適用。

復元力を起こす(プラズマ成に寄与する項)

電子ガス: 一様な正電荷が分布した状態に電子が存在する
ハミルトニアンは
$$H = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{N}p_i^2 + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1,j\neq i}^{N}\frac{e^2}{|r_i - r_j|} - U_0$$

m: 電子の質量、N:電子の数、第2項:電子間クーロン相互作用、第3項: 一様な正電荷のポテン シャルエネルギー。

第2項であるクーロン項を無視したものを自由電子ガスと言う。第3項は系の全電荷が中性となる必要がある。電子の分布が変化しようとすると復元力が働く。

阻止能の歴史:

自由電子ガスモデル

Historical Review

(This review is taken from "The Stopping and Range of Ions in Matter")

Early Studies with Radioactive Particles (1899 - 1920)

Quantum Mechanics and Stopping Theory (1930 - 1935)

Analysis of Fission Fragments (1938 - 1941)

Particle Stopping in a Free Electron Gas (1947 – 1960)

Theories for Stopping & Ranges of Heavy Ions (1963 – 1985)

http://www.srim.org/SRIM/History/HISTORY.htm

トラック構造シミュレーションでの

チャタジーモデルの取り扱い

The core-penumbra model does not reflect the physical reality: More than 80% of the total energy loss is used to liberate electrons from the target atom and to emit these δ -electrons with high energies. Less than 10% is left over for excitation. Therefore an equipartition of the energy between core and penum – bra does not hold. In addition, excitation does not result in chemical damage except for a few supercited states. Excitation is therefore not relevant for the biological action.

G. Kraft, et al., Rad. Env. Bio. 31, 161 (1980)

電離と励起過程の比較からチャタジーモデルを現実的でないと判断。

プラズマ振動に関しては述べていない。

本研究ではプラズマ振動の生成過程を取り扱う(チャタジーモデルの 再現を目指して)



(II)シミュレーションモデル

シミュレーションモデル1: 概念

目的:経験的、人工的な近似の使用をできる限り減らし、現実に近い系をめざす。



シミュレーションモデル2:手順





粒子が断面積を通過したときのみ過程が起きるとする

Z. Jurek et al., Eur. Phys. J.D, 29, 217 (2004) (分子動力学) で同じ手法を使用











(III)原子分子データ

使用した粒子衝突断面積

(i) イオン衝突電離

(ii)電子衝突電離 · 励起



C.D. Cappello *et al.*,nucl.Ins.Meth.Phys.Res.B, **267**, 781 (2009)

Phys. B **20** 3923 (1987). 励起: H.P. Pritchard, *et al.*, Phys.Rev. A **41**, 546 (1990).

イオン衝突電離での二次電子のエネルギー

二次電子のエネルギーは、粒子、粒子のエネルギー、種類による依存性は弱い。角度分布は異なる。



Private communications with Iriki, Tsuchida and Ito (Kyoto Uni.)



C.D. Cappello et al., nucl.Ins.Meth.Phys.Res.B, **267**, 781 (2009)

C. Chempion et al., Phys. Rev. A, 75, 032724 (2007)



これらの実験データより, (i) *K_{exp}*の大部分は20 eVより小さい。

(ii) K_{exp}< 20 eVに対して放出角度は等法的である

水に対する液相と気相の阻止能の比較



ICRUが出版したデータ



(IV)デモ

Demo 1: The ions are produced from incident ion impact ionization cross sections

Here are plots of places of water molecular ions.



K. Morbayashi, Phys.Rev.A, 84, 012702 (2011).

The interval lengths between ions decrease with increasing these cross sections. The average interval lengths agree with mean path between ionization events(τ). $\tau = \frac{1}{n\sigma_{ion}}$ n: density of water molecules σ ion: incident ion impact ionization cross sections



Demo: The energy loss of secondary electron kinetic energies due to the electric field formed from molecular ions as a function of x. Incident ions: a proton with 1 MeV/u and a C⁶⁺ ion with 3 MeV/u Emission angles θ = 30 °, 60 °, and 90 °



Energy loss of secondary electrons due to electric field formed from molecular ions





(i) When K = 100 eV, K_x are 100 eV, 75 eV, and 25 eV at $\theta = 90^{\circ}$, 60°, and 30°,

respectively [see the term of $[sin(\theta)]^2$ in the equation].

(ii) When K_x becomes 0, the secondary electrons become to be trapped.

(iii) For C⁶⁺ with 3MeV/u, $K \le 40 \text{ eV}$, 50 eV, 160 eV are trapped within the 6 nm

from the track at θ = 90 °, 60 °, and 30 °, respectively.

 $K_{x} = \frac{1}{2}m_{e}v_{x}^{2} = \frac{1}{2}m_{e}v^{2}[\sin(\vartheta)]^{2} = K[\sin(\vartheta)]^{2}$ K: initial kinetic energy of an ejected electron



(V) 結果と議論



We calculate the probabilities where secondary electrons are trapped within 1 nm from the track of an incident ion.

(i) Probability increases with the increase of σ_{ion} .

(ii) The differences between the probabilities including and excluding polarization are about (1) 10, (2)30, (3)44 %. respectively

→ The effect of polarization increases as σ_{ion} becomes smaller.

K. Moribayashi, Phys.Rev.A, 84, 012702 (2011), Rad. Phys. Chem., in press (2012)



(ii) イオン種が異なっても断面積が同じなり割合はほぼ同じ。



symbols). So, σ_{ion} may determine D_e and T_e in the core region.

K. Moribayashi, Rad. Phys. Chem., in press (2012), to be submitted to Nucl. Inst. Meth. Phy. Res. B

結論

経験的、人工的な近似の使用をできる限り減らし、現実 近い二次電子の運動のシミュレーションモデルを開発し た。

分子イオン(入射イオンの衝突電離で生成)の合成電場 が二次電子の運動に大きく寄与することを発見。 この電場の影響を調べた。

得た知見

(i) 二次電子がトラック付近にトラップされる確率はイオン衝突電離
断面積(σ_{ion})と共に増加。

(ii) 分極の効果はσ_{ion}と共に減少。

(iii) σ_{ion} はプラズマパラメータ D_e と T_e を決める鍵となる可能性

Future plans

The scenario proposed here for phenomena in the core region

