

质子、 α 粒子在水中的径迹结构*

曹天光^{1;1)} 马云志^{1,2} 卓益忠^{1,3}

1 (中国原子能科学研究院 北京 102413)

2 (北京师范大学低能核物理研究所 北京 100875)

3 (兰州重离子加速器国家重点实验室原子核理论中心 兰州 730000)

摘要 简述了一个模拟质子、 α 粒子的蒙特卡罗径迹结构模型,考虑了质子、 α 粒子在水中输运时的电离、激发等非弹性散射机制,模拟计算了质子、 α 粒子在水蒸气(密度为 $1\text{g}/\text{cm}^3$)中的径迹,质子、 α 粒子的能量范围为 $0.3\text{--}5\text{MeV}/\text{u}$. 考虑了产生的大量低能电子(能量下限为 1eV)在水介质中的输运. 计算得到的射程、径向剂量等参数,与实验数据符合得较好.

关键词 蒙特卡罗方法 径迹结构 低能电子

1 引言

在电离辐射导致生物效应的研究中,人们越来越认识到辐射导致生物损伤和变异的靶目标是对电离辐射敏感的纳米尺度的靶分子(如 DNA 分子). 这样,宏观计量学中计算平均剂量的办法显得很粗糙,人们不得不在纳米尺度上来研究电离辐射能量的分布,因此纳米尺度范围内的化学改变的空间关联对于研究带电粒子引起的生物损伤和变异具有重要意义.

生物体系对电离辐射的响应不仅依赖于平均吸收剂量(即单位质量吸收的平均能量),而且依赖于辐射粒子的类型和能量(这一点在同等剂量下表现出来)^[1]. 人们通常认为生物体系对电离辐射的响应起源于不同的带电粒子产生不同的径迹结构,这里的“不同”是指描述径迹结构的特征统计量取不同的数值. 当前的趋势是研究微米甚至纳米尺度上的能量沉积. 因为在其他因素都相同的情况下,靶尺度越小,统计涨落越大,所以必需抛弃确定性的办法,采用随机性的办法. 用蒙特卡罗方法模拟径迹结构正是这样一种随机性的方法.

近二十年来,国际上已经开发了一些模拟带电粒子径迹结构的程序,如 MOCA15, PITS^[2], TRION^[3] 等. 德国 GSI 的 H G Paretzke 教授给我们提供了 MOCA15 的源代码,我们在此程序的基础上做了两点改进,第一,在模拟过程中 MOCA15 采用的双微分截面是固定在入射能量点处的数据表,而不是随能量变化更新的数据表列. 这样的模拟无法给出正确的布拉格峰. 应用 MOCA15 中的 ICROSS8 生成了不同能量点处的双微分截面,并使 MOCA15 的模拟采用随能量变化的双微分截面. 改进后的程序能够给出合适的布拉格峰. 其二,MOCA15 中跟踪次级电子的程序考虑的截止能量过高(10eV). 然而,近来的实验表明低能电子(低于 10eV)可以通过共振机制导致 DNA 的双链断裂^[4],因而是应该忽略的. 用自己开发的电子程序取代了原有的电子部分,这样次级电子径迹结构跟踪到 1eV ^[5],以便将来考虑共振机制.

因为水是大多数生物细胞的主要物质,约为细胞鲜重的 $80\% \text{--}90\%$,并且绝大部分以游离态水的形式存在,所以选择水作为模拟介质. 由于实验和理论的缺乏,液态水的截面几乎没有. 另一方面,

2003-08-11 收稿,2003-09-22 收修改稿

* 国家自然科学基金(10175095)资助

1) E-mail: tgcgao@iris.ciae.ac.cn

带电粒子与水分子的碰撞截面经过几十年的积累,比较全面,比较可靠. 因此,在径迹结构发展的历史中,人们几乎都选择等密度($1\text{g}/\text{cm}^3$)气态水作模拟介质. 相比而言,气态水模型忽略了分子间相互作用,降低了价电子束缚能和阻止截面. 根据 ICRU 推荐的阻止截面,气态水阻止截面大于液态水阻止截面. 在我们计算的能区内,质子能量取 0.3MeV 时,两者的差别最大,相对差别为 2% . 近来已经有了一些液态水截面的理论计算^[6-9],但缺乏实验的支持,理论处理也不严格. 在模拟中用液态水的截面也是正在考虑的一个问题.

在模拟计算中,质子的截面用理论公式和半经验的模型公式得到, α 粒子的截面是采用有效电荷的办法由质子的截面度规得到的. 质子、 α 粒子的能量限定在 $0.3-5\text{MeV}/u$. 对产生的次级电子跟踪到截止能量 1eV .

2 理论与计算

和其他主要模型一样,在此能区 MOCA15 截面也是主要基于 Bethe-Born 理论^[10](即平面波波恩近似 PWBA),还有一些半经验模型作为补充^[11],这里主要简述模拟所需要的各种几率表的计算.

快带电粒子与介质的主要相互作用类型是靶分子中价电子的电离,如果能量足够多,次级电子将引起进一步电离或其他反应,形成自身的径迹. 因此,实现径迹结构模拟的最重要的信息是 δ 电子的单微分截面和双微分截面,即 δ 电子的能谱和角分布.

1) 次级电子能谱

根据 Bethe-Born 理论^[10],一个速度为 v 、电荷为 z 的离子碰出电子的单微分截面(SDCS)公式为

$$\frac{d\sigma}{dw} = \frac{4\pi a_0^2 z^2}{T} \left[A(w) \ln\left(\frac{4T}{R}\right) + B(w, T) + O\left(\frac{1}{T}\right) \right], \quad (1)$$

w 是电子能量, a_0 是玻尔半径, R 是里德堡能量 (13.6eV), $T = mv^2/2$, m 是电子质量. 其中 $A(w)$ 是“擦碰”项,碰撞参数大,描述的是碰撞中的小动量转移事件,可由光学近似得到

$$A(w) = \sum_{k=1}^N \frac{R^2}{w + I_k} \frac{df_k}{dw}, \quad (2)$$

I_k 是 k 壳层束缚能, df_k/dw 是 k 壳层光学振子强度

$$\frac{df_k}{dw} = \text{const} \times \sigma_{\text{ph}}(w + I_k), \quad (3)$$

σ_{ph} 是光吸收截面. $B(w, T)$ 是“正碰”项,碰撞参数

小,描述的是较大的动量转移事件. $B(w, T)$ 有两个极限行为

$$\lim_{w \rightarrow 0} B(w, T) = B(w) + O\left(\frac{w}{T}\right), \quad (4)$$

$$\lim_{w \rightarrow \infty} B(w, T) = \frac{T}{4\pi a_0^2 z^2} \frac{d\sigma}{dw} \Big|_{\text{BEA}}, \quad (5)$$

$w \rightarrow 0$ 时, $B(w)$ 与 T 无关,这样可以根据某一 T 值时的单微分截面的可靠的实验值和 $A(w)$ 的光学近似值来确定 $B(w)$,为了减小实验误差的影响,实际计算中可以多选几个 T 值处的 $d\sigma/dw$ 来求平均值,

$$B(w) = \frac{T}{4\pi a_0^2 z^2} \frac{d\sigma}{dw} \Big|_{\text{exp}} - A(w) \ln\left(\frac{4T}{R}\right), \quad (6)$$

当 $w \rightarrow \infty$ 时, $B(w)$ 可用两体碰撞近似(BEA)理论来计算.

图 1 给出了 1MeV 质子与水分子作用产生的电子的单微分截面与实验值^[12]的比较. 二者符合得相当好,低于 5eV 时实验值精度较差,差别也较大. 540eV 的小突起是由于氧的内壳层发射电子的贡献,它的计算与上面价电子电离的计算是分开的. 图中计算结果没有给出氧的内壳层的贡献.

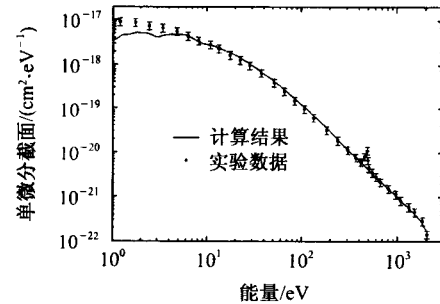


图 1 1MeV 质子与水分子作用产生的电子的单微分截面与实验值^[12]的比较

2) 次级电子角分布

基于 Bethe-Born 理论,次级电子的角分布即双微分截面可以表示为^[13],

$$\sigma(\theta, w) = \frac{4\pi a_0^2 z^2}{T/R} \left[A(\theta, w) \ln\left(\frac{T}{R}\right) + B(\theta, w) + O\left(\frac{1}{T}\right) \right], \quad (7)$$

其中 $A(\theta, w)$ 是“擦碰”项,由能谱部分和角度部分构成,

$$A(\theta, w) = \frac{1}{4\pi} \sum_j \left(\frac{R}{w + I_j} \frac{df_j}{dw} \times \left[1 + \frac{\beta_j}{2} P_2(\cos\theta) \right] \right), \quad (8)$$

在角度部分, P_2 是二阶勒让德多项式,

$$P_2 = \frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2}, \quad (9)$$

β_j 是 j 壳层出射光电子的非对称因子,这是一个经验因子,是为了更好地符合实验角分布,

$$\beta_j = \begin{cases} 2 & j = 1 \\ \max\{0, 1 - \exp(0.168 - 0.024w)\} & j = 2, 3, 4 \end{cases}, \quad (10)$$

(7)式中 $B(\theta, w)$ 是“正碰”项,可表示为

$$B(\theta, w) \sim g_w(\theta) \times S_{\text{bea}}(w) \times f_{\text{bea}}(w), \quad (11)$$

$g_w(\theta)$ 是角度相关项,取高斯形式,

$$g_w(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Gamma} \exp\left[-\left(\frac{\cos\theta - \overline{\cos\theta}}{\Gamma}\right)^2\right], \quad (12)$$

$S_{\text{bea}}(w)$ 是能谱部分,可由 BEA 理论得到^[14].

用上述公式计算了 1MeV 质子与水分子作用产生的次级电子的双微分截面并和实验值^[12]做了比较,如图 2 所示. 计算结果和实验值在峰值附近符合得较好,小角度符合不好主要是因为现在的双微分截面计算没有考虑电荷交换相互作用的贡献.

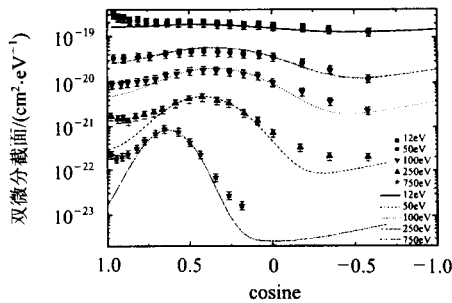


图 2 1MeV 质子与水分子作用产生的电子的双微分截面计算值与实验值^[12]的比较
点为实验数据,线为计算结果.

非弹相互作用的总截面是电离截面和激发截面的和

$$\sigma_T = \sigma_{\text{ions}} + \sigma_{\text{excit}}. \quad (13)$$

非弹相互作用的平均自由程为

$$\lambda = \frac{1}{N\sigma_T}, \quad (14)$$

其中 N 为单位体积内的散射中心的数目. 模拟中靶模型采用连续介质近似,所以自由程按指数分布抽样,

$$f(l)dl = \frac{1}{\lambda} e^{-\frac{l}{\lambda}} dl. \quad (15)$$

3 结果与讨论

利用上面所述的模型理论,用蒙特卡罗方法模

拟计算了质子、α 粒子在等效生物组织水中的径迹结构.

图 3 是 1 个 1MeV 质子和 1 个 1MeV α 粒子在水中 50nm 典型的径迹结构片断,点表示相互作用点位置,α 粒子由于有 2 个电荷,质量也较重,产生的次级电子也较多.

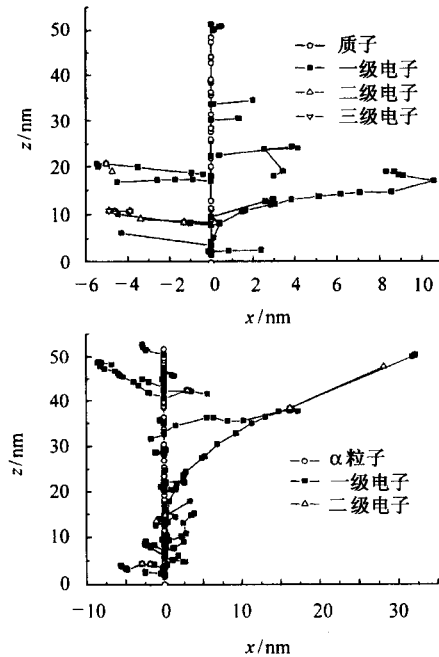


图 3 1MeV 质子和 1MeV α 粒子在水中 50nm 典型的径迹结构片断

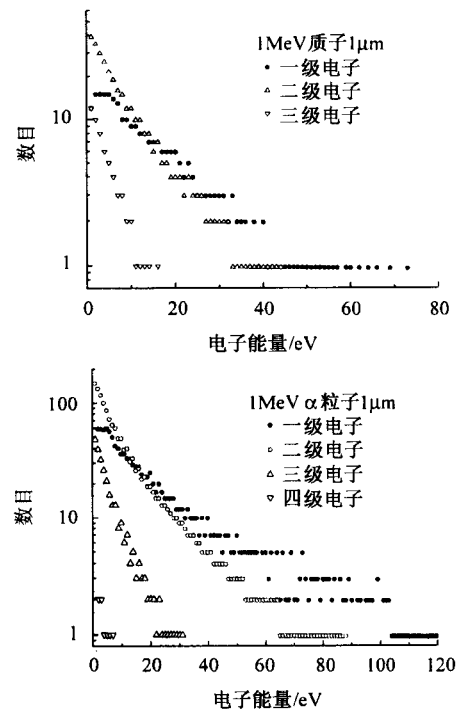


图 4 1MeV 质子和 α 粒子在水中 1μm 产生的次级电子数目与能量的关系

图 4 给出的是 10000 个 1MeV 质子和 10000 个 α 粒子在水中 $1\mu\text{m}$ 产生的次级电子的平均数目与能量的关系. 质子在 $1\mu\text{m}$ 的距离损失能量约 26keV 产生的一级、二级、三级、四级电子数目分别为 370, 400, 80 和 3 个. α 粒子在 $1\mu\text{m}$ 的距离损失能量约 100keV 产生的一级、二级、三级、四级电子数目分别为 1410, 1520, 300 和 12 个.

图 5 是 10000 个质子和 10000 个 α 粒子在水中模拟计算的平均射程与国际原子能机构 (IAEA) 推荐的程序 STAR^[15] 计算结果的比较, 符合得很好. 由于实验数据的缺乏在较低能量时模拟计算的结果和 STAR 的计算结果有一定的偏离.

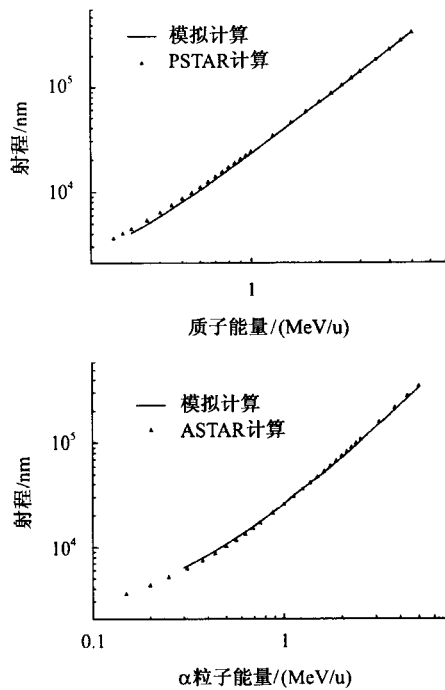


图 5 质子、 α 在水中射程与能量的关系同 IAEA 推荐的程序 STAR^[15] 计算结果的比较

带电粒子在前进过程中与介质发生相互作用损失能量, 产生的次级电子使得能量在空间上形成一定的分布. 径向剂量反映入射粒子损失的能量在一定径向距离考虑的柱壳体积内单位质量沉积的能量, 可由下式得到,

$$D(R) = \frac{\int_R^{R+dR} \int_0^{2\pi} \int_{z_{\min}}^{z_{\max}} E(r, \theta, z) dr d\theta dz}{V \rho N_{\text{ions}}}, \quad (16)$$

$$V = 2\pi R dR (z_{\max} - z_{\min}),$$

式中 $E(r, \theta, z)$ 是在 (r, θ, z) 点沉积的能量, 积分是对柱壳体积内沉积的能量求和, 计算中 dR 取 1nm , $(z_{\max} - z_{\min}) = 2\mu\text{m}$. 径向剂量可以用来检验径迹结

果计算的可靠性. 图 6 是计算了 10000 个 1MeV 质子和 10000 个 1MeV α 粒子在水中 $2\mu\text{m}$ 距离径迹的平均径向剂量与实验值^[16] 的比较, 质子在此距离范围总能量沉积是 52keV, 结果还是合理的. α 粒子能量沉积 190keV, 符合得不是太好, 是因为其双微分截面的不准确所致. 由图可见能量沉积的半宽度约在径向距离 10nm 左右, 因而从径迹结构的观点来看, 辐射损伤形成的区域也应在这个范围内.

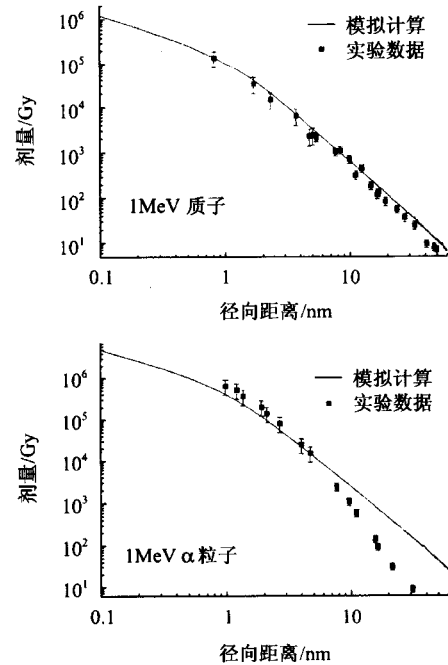


图 6 1MeV 质子和 α 粒子在水中 $2\mu\text{m}$ 距离径迹的径向剂量与实验值^[16] 的比较

4 结论与展望

近几年来, 电离辐射导致生物损伤的问题越来越引起人们的重视, 并且对辐射损伤的研究深入到纳米尺度, 径迹结构模型可以在纳米尺度给出能量损失的在空间上的分布, 因而是研究辐射生物损伤的很重要的一种方法.

用径迹结构模型模拟计算了质子、 α 粒子在水中的径迹结构, 给出了质子与水分子作用产生电子的单微分截面、双微分截面与实验值的比较, 给出了质子、 α 粒子的射程、产生的电子的径向剂量等, 结果较好地符合了实验值或 IAEA 的推荐结果. 由于截面的缺乏或方法的不同, 在某些计算结果中还有较大的差别.

一直以来, 发展的模型理论中, 由于截面的缺乏, 入射粒子的有效能量需高于 0.3MeV/u . 直到最

近才有低于 0.3MeV/u 的理 论文章^[6-9], 给出了比较好的阻止截面. 因此, 电离辐射导致生物损伤的实验和理论还有待于进一步的发展, 径迹结构模型也需要进一步的发展, 这方面还有相当多的工作要做.

做.

感谢德国 GSF H. G. Paretzke 教授为本工作提供质子、 α 粒子径迹结构模拟程序 MOCA15.

参考文献 (References)

- Rossi H H, Zaider M. Microdosimetry and Its Application. Berlin: Springer, 1996. 1—10
- Willson W E, Nikjoo H. Radiat. Environ. Biophys., 1999, **38**:97—104
- Lappa A W, Bigildev E A, Burminstrov D S et al. Radiat. Environ. Biophys., 1993, **32**:1—19
- Badla Boudalffa, Pierre Cloutier, Darel Hunting et al. Science, 2000, **287**:1658—1660
- MA Yun-Zhi, CAO Tian-Guang, ZHUO Yi-Zhong. HEP & NP, 2003, **27**(4):319—323(in Chinese)
(马云志, 曹天光, 卓益忠. 高能物理与核物理, 2003, **27**(4):319—323)
- Dingfelder M, Inokuti M, Paretzke H G. Rad. Phys. Chem., 1998, **53**:1—18
- Dingfelder M, Inokuti M, Paretzke H G. Rad. Phys. Chem., 2000, **59**:255—275
- Uehara S, Toburen L H, Wilson W E et al. Rad. Phys. Chem., 2000, **59**:1—11
- Uehara S, Toburen L H, Nikjoo H. Int. J. Radiat. Biol., 2001, **77**(2):139—154
- Inokuti M. Rev. Mod. Phys., 1971, **43**:297—347
- Miller J H, Wilson W E, Manson S T. Radiat. Prot. Dosim., 1985, **13**:27—30
- Toburen L H, Wilson W E. J Chem. Phys., 1977, **66**:5202—5213
- Kim Y. Phys. Rev. A, 1972, **6**:666—670
- Rudd M E, Macek J H. Case Studies in Atomic Physics, 1972, **3**:47—136
- Berger M J. ESTAR PSTAR and ASTAR. In: IAEA. IAEA-TECDOC-799 Atomic and Molecular Data for Radiotherapy and Radiation Research. Austria: IAEA. 1995. 723—740
- Wingate C L, Baum J W. Radiat. Res., 1976, **65**:1—19

Track Structure of Proton and α Particle in Water *

CAO Tian-Guang^{1,1)} MA Yun-Zhi^{1,2} ZHUO Yi-Zhong^{1,3}

1 (China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413, China)

2 (Institute of Low Energy Nuclear Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China)

3 (Center of Theoretical Nuclear Physics, National Laboratory of Heavy Ion Accelerator, Lanzhou 730000, China)

Abstract Taking into account of inelastic scattering process, such as ionization, excitation et al., a Monte Carlo track structure model of the proton and α particle in water has been described. In the simulation, the energy range of proton and α particle is about 0.3—5MeV/u. The cutoff energy of secondary energy electron is taken as 1eV. Tracks were analyzed to provide confirmation on the reliability of the code and the information on physical parameters, such as range, radial dose profiles. Our Model calculation shows the good agreement with the experimental data.

Key words Monte Carlo method, track structure, low energy electron

Received 11 August 2003, Revised 22 September 2003

* Supported by NSFC (101759095)

1)E-mail: tgcgao@iris.ciae.ac.cn