

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 2 年 6 月 5 日現在

機関番号：82110

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2017～2019

課題番号：17K07022

研究課題名（和文）イオントラックコアによる微視的複雑体系の放射線作用解明研究

研究課題名（英文）Elucidation study of radiation interaction of microscopic complex systems in ion track core

研究代表者

甲斐 健師（KAI, Takeshi）

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・原子力科学研究部門 原子力科学研究所 原子力基礎工学研究センター・研究副主幹

研究者番号：70403037

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,500,000円

研究成果の概要（和文）：放射線と物質の相互作用研究において、PHITSのような汎用放射線輸送計算コードは、マクロな複雑体系における線量評価と共に、ナノスケールの微視的空間内で誘発される放射線作用研究への適用も期待されている。これは、放射線作用がミクロな物理的現象であるにも関わらず、その主体となる低速電子の放射線作用が未解明要素を多く含むためである。本研究では、PHITSの低速電子挙動計算機能を開発し、微視的複雑体系における放射線作用を計算可能にする。これまで計算が困難であったイオン照射によるDNAの複雑損傷機構解明を目指す。更に、様々な物質に対する電子衝突断面積データを開発することで、本計算機能の波及効果を狙う。

研究成果の学術的意義や社会的意義

今日まで、水における低エネルギー電子の挙動を模擬する飛跡構造コードは複数開発されているが、これらの計算コードは複雑体系を自由に模擬できず、基本的に10eV程度までしか電子挙動を計算しない。本研究は、電子の熱平衡化までを目標とし、非常に独創的且つ画期的である。更に、本研究は水以外の物質も適用可能にする計画を進めるため、これまで着手できなかった物質に対する放射線作用・加熱機構解明に強く関与する。PHITSは一般公開されているため、ナノスケールの物理・化学現象を対象とする研究者が、計算の専門家に頼らずとも、実験デザインや解析が可能になるため、本研究の意義は非常に高い。

研究成果の概要（英文）：A general purpose particle transport simulation code, PHITS is expected to apply dose evaluation in macroscopic systems as well as radiation interaction investigation in nanoscale for study of interaction between radiations and materials. Although the interaction itself is micro physical phenomena in material, the interactions of the low energy electrons have included much unknown factors. In this study, we developed track structure mode of the PHITS. The mode makes calculations of radiation interactions in microscopic complex systems possible. Using the mode, we aim to elucidate the radiation DNA damage induced by ions irradiation into the complex system. We also aim to spreading effect of the mode by the development of database for cross sections of various material.

研究分野：工学

キーワード：放射線工学・ビーム科学 イオン飛跡 DNA損傷

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

放射線と物質の相互作用の研究は、原子力産業、加速器遮蔽設計、放射線治療など様々な分野に応用されている。物質に放射線を照射すると、原子核反応による2次粒子生成や、原子の電離・励起が誘発され、更に電離により無数に生じた低エネルギー2次電子が物質を加熱する。これら一連の物理現象を計算機で模擬するために、日本原子力研究開発機構では、粒子・重イオン輸送計算コード PHITS [1]の開発を行っている。PHITS は任意の体系における様々な放射線輸送計算が可能であり、且つ一般公開されていることから、研究開発当初においても利用登録者数は2500名を超えており、現在では、4000名を超える。PHITS は精度の高い核データライブラリを利用又は、様々な原子核反応モデルを実装しているため、高エネルギー放射線の輸送計算は非常に精度が高い。その一方、物質中で無数に生成され、ナノスケールの微小空間内に放射線作用を誘発する低エネルギー電子の計算機能については解決すべき課題が存在する。そのため、PHITS の適用空間スケールは人体レベルが主となり、細胞レベルが限界である。そのため研究開発当初は、放射線 DNA 損傷の様なナノスケールの空間分解能が必要とされる研究課題への適用は困難であった。

細胞中に進入した放射線が DNA の2ヘリカルターン(6nm)以内に複数の損傷部位を生成し、その損傷が修復されないと突然変異のような生物影響が誘発されと考えられている。申請者は、微視的放射線作用を模擬するために飛跡構造解析コードを開発し、放射線 DNA 損傷の形成メカニズムの解明に取り組んでいる[2]。細胞中に照射されたイオンは、その飛跡に沿って無数の2次電子を生成し、電離や電子的励起のような分子の構造変化をもたらす作用を誘発する(トラックコア(動径10nm程度))。生体内のDNAはヒストン蛋白と結合したヌクレオソーム構造(10nm)を形成している。そのため、生体内におけるDNA損傷の空間分布は、標的構造に強く依存すると考えられるが、一般的な飛跡構造解析コードを利用すると、ヌクレオソームのような微視的複雑体系を模擬することは困難である。

PHITSをはじめとする汎用放射線輸送計算コードは、主にマクロな複雑体系(mmからcm単位)に対するエネルギー付与計算機能を整備している。一方、申請者が開発している飛跡構造解析コードは、ナノスケールの微視的空間における放射線作用を計算することが可能である。そこで、DNA損傷解析等を含む生命科学のみならず、照射材料工学・半導体工学等を含む物質科学における放射線作用研究を促進するため、PHITSの飛跡構造解析モードを開発する。これにより、放射線DNA損傷、宇宙線起因ソフトエラー解析、シンチレータ材料解析等、PHITSの適応範囲の拡張が期待できる。

2. 研究の目的

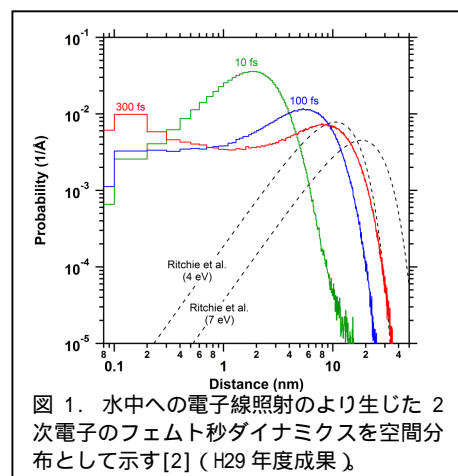
本研究課題では、照射イオンが生み出す2次電子の計算機能を開発するため、独自に開発している電子飛跡構造解析コードを改良し、PHITSに実装する。既存のイオンの飛跡構造解析コード(KURBUC)をPHITSに実装することで、PHITSのイオン飛跡構造解析モードを開発し、イオントラックコアの詳細解析を可能にする。さらに、PHITSによる放射線の飛跡構造解析の結果を利用したDNA損傷解析ツールを開発し、実験結果と検証する。これにより、本研究課題で開発する飛跡構造解析モードの精度を実証する。本解析モードを一般公開することで、本研究成果の波及効果を狙う。

3. 研究の方法

本研究課題は、計算コード開発を中心に展開するため、コード検証を実施しながら進める。平成29年度は、独自に開発している電子飛跡構造解析コードを高度化する。このコードを検証するため、実験予測値と比較する。コードの精度を実証した後、PHITSへの実装を試みる。PHITSへの実装に関しては、PHITS開発の中心メンバーである佐藤(連携研究者)の協力を得ることで、さまざまな機能への適用を実現する。放射線作用を研究するうえで重要となるのが衝突断面積である。水に関する衝突断面積データベースは独自に開発済であるが、一般ユーザーはさまざまな物質を標的にすると想定する。精度の高い衝突断面積を幅広いエネルギー領域で完備することは困難であるため、簡易的に水の断面積を標的物質の電子密度でスケールリングする手法も開発する。

平成30年度は、既存の飛跡構造解析コード(KURBUC)をPHITSに実装することで、イオントラックコアにおける微視的放射線作用を解析可能にする。KURBUCは、放射線DNA損傷の研究で顕著な成果を収めており、本研究課題においても、さまざまな放射線によるDNA損傷解析を実現するためである。本解析モードの開発にあたり、従来機能との切り替え等も可能にすることで、一般ユーザーが柔軟に利用できるように開発を進める。

令和元年度は、PHITSの飛跡構造解析モードを利用したDNA損傷ツールの開発に取り組み、実験結果と比較することで、本解析モードの精度を検証する。



4. 研究成果

水に放射線を照射した結果生じる低エネルギー二次電子の放出長は、実験値のパラメータ解析によると10nm程度になると予測されている。独自に開発している電子飛跡構造解析コードの精度を検証するため、水中に照射した電子線から生じる二次電子の放出長を計算した。その結果を図1に示す。これにより、二次電子の空間分布は親イオン近傍を除くとガウス型を示し、10nm程度になることが分かる。これにより、コードの精度を実証した[2]。この精度を実証したコードの計算アルゴリズムのみ改良し、PHITSに実装した。この段階では、水の衝突断面積のみしか整備されていなかった。さまざまな物質へ適用するため、衝突断面積を標的物質の電子密度でスケールアップすることで簡易的に対応可能にした。これにより、電子線に関しては、複雑体系におけるさまざまな標的の微視的放射線作用を解析可能にした。本研究成果は、PHITS ver2.93にて一般公開されている。

平成30年度は、KURBUCをPHITSに実装した。これにより、PHITSの飛跡構造解析モードで利用可能なイオン種は、電子線、陽子線、炭素線となった。PHITSのイオン飛跡構造解析モードを利用した結果の一例として、水中に炭素線を照射した際の飛跡構造の結果を示す。この結果から、数本の高エネルギー線が発生しているが、イオン線飛跡に沿って10nm程度の領域に形成されるトラックコアは、非常に吸収線量が高くなることが容易にわかる。本研究成果により、イオントラックコアにおける微視的複雑体系の放射線作用を解析可能にした。

令和元年度は、PHITSの飛跡構造解析モードを利用したDNA損傷ツールの開発に取り組んだ。その成果を図2に示す。本シミュレーション結果は、実験値や先行研究によるシミュレーション結果を高精度で再現する[3,4]。本解析モードを利用すると、細胞への放射線照射実験を高精度で解析でき、放射線DNA損傷を中心とした生物影響研究の基盤になり得ると考えられる。

本研究で目指したイオン飛跡構造解析モード・DNA損傷解析の開発は共に完了し、PHITS ver3.20において一般公開するに至った。これにより、多くのユーザーが利用可能になったことで、本研究で目指したイオントラックコアによる微視的複雑体系の放射線作用の解明が飛躍的に進展することが期待される。

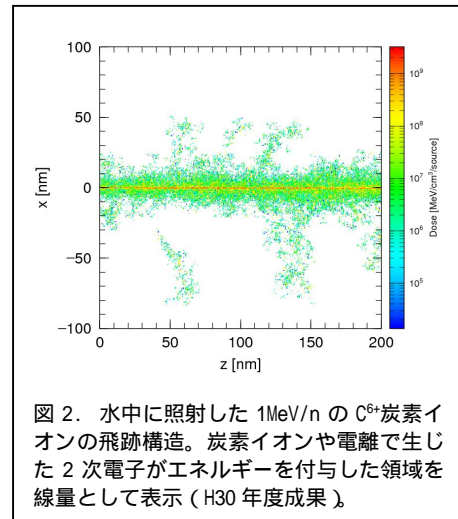


図2. 水中に照射した1MeV/nのC⁶⁺炭素イオンの飛跡構造。炭素イオンや電離で生じた二次電子がエネルギーを付与した領域を線量として表示（H30年度成果）。

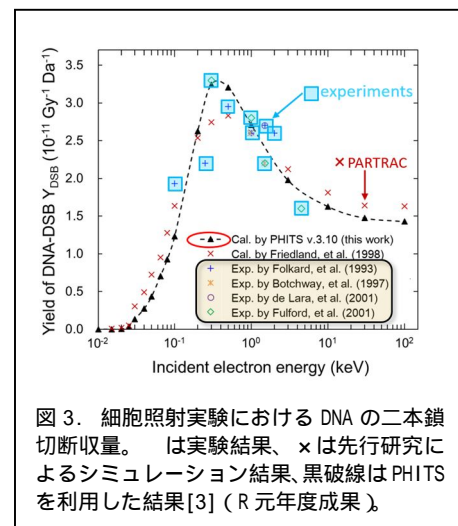


図3. 細胞照射実験におけるDNAの二本鎖切断収量。は実験結果、×は先行研究によるシミュレーション結果、黒破線はPHITSを利用した結果[3]（R元年度成果）。

<引用文献>

- T. Sato, Y. Iwamoto, S. Hashimoto, T. Ogawa, T. Furuta, S. Abe, T. Kai et al. "Features of Particle and Heavy Ion Transport Code System PHITS Version 3.02" JNST, 55, 684 (2018).
- T. Kai et al. "A significant role of non-thermal equilibrated electrons in the formation of deleterious complex DNA damage" PCCP, 20, 2838 (2018).
- Y. Matsuya, T. Kai et al. "Modeling of yield estimation for DNA strand breaks based on Monte Carlo simulations of electron track structure in liquid water" JAP, 126, 124701 (2019).
- Y. Matsuya, T. Nakano, T. Kai et al. "A Simplified Cluster Analysis of Electron Track Structure for Estimating Complex DNA Damage Yields" IJMS, 21, 1701 (2020).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 4件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 1件）

| | |
|---|-----------------------------|
| 1. 著者名 甲斐健師、横谷明德、藤井健太郎、渡邊立子 | 4. 巻 106 |
| 2. 論文標題 放射線物理化学過程に関する最近の進展（後編） | 5. 発行年 2018年 |
| 3. 雑誌名 放射線化学 | 6. 最初と最後の頁 21-29 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |
| 1. 著者名 Kai Takeshi, Yokoya Akinari, Ukai Masatoshi, Fujii Kentaro, Toigawa Tomohiro, Watanabe Ritsuko | 4. 巻 20 |
| 2. 論文標題 A significant role of non-thermal equilibrated electrons in the formation of deleterious complex DNA damage | 5. 発行年 2018年 |
| 3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics | 6. 最初と最後の頁 2838 ~ 2844 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1039/c7cp06903k | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |
| 1. 著者名 Sato Tatsuhiko, Iwamoto Yosuke, Hashimoto Shintaro, Ogawa Tatsuhiko, Furuta Takuya, Abe Shin-ichiro, Kai Takeshi, Tsai Pi-En, Matsuda Norihiro, Iwase Hiroshi, Shigyo Nobuhiro, Sihver Lembit, Niita Koji | 4. 巻 55 |
| 2. 論文標題 Features of Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) version 3.02 | 5. 発行年 2018年 |
| 3. 雑誌名 Journal of Nuclear Science and Technology | 6. 最初と最後の頁 684 ~ 690 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1080/00223131.2017.1419890 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である） | 国際共著 該当する |
| 1. 著者名 Matsuya Yusuke, Kai Takeshi, Yoshii Yuji, Yachi Yoshie, Naijyo Shingo, Date Hiroyuki, Sato Tatsuhiko | 4. 巻 126 |
| 2. 論文標題 Modeling of yield estimation for DNA strand breaks based on Monte Carlo simulations of electron track structure in liquid water | 5. 発行年 2019年 |
| 3. 雑誌名 Journal of Applied Physics | 6. 最初と最後の頁 124701~124701 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1063/1.5115519 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|--|-------------------------|
| 1. 著者名 Matsuya Yusuke, Nakano Toshiaki, Kai Takeshi, Shikazono Naoya, Akamatsu ken, Yoshii Yuji, Sato Tatsuhiko | 4. 巻 21 |
| 2. 論文標題 A Simplified Cluster Analysis of Electron Track Structure for Estimating Complex DNA Damage Yields | 5. 発行年 2020年 |
| 3. 雑誌名 International Journal of Molecular Sciences | 6. 最初と最後の頁 1701~1701 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/ijms21051701 | 査読の有無 無 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

〔学会発表〕 計9件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件)

| |
|--|
| 1. 発表者名 甲斐健師 |
| 2. 発表標題 DNA損傷プロセスにおける低速電子の半古典的動力学解析 |
| 3. 学会等名 量子生命科学研究会第2回学術集会 |
| 4. 発表年 2018年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 甲斐健師, 米谷 佳晃 |
| 2. 発表標題 水の放射線分解で誘発された低エネルギー電子の動的挙動解析 |
| 3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会 |
| 4. 発表年 2018年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 甲斐健師, 佐藤達彦, Thiansin Liamsuwan, Hooshang Nikjoo |
| 2. 発表標題 PHITSにおけるイオンの飛跡構造計算機能の開発 |
| 3. 学会等名 第66回応用物理学会 |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 甲斐健師 |
| 2. 発表標題 最先端の物理的・化学的手法から探る凝縮相の放射線分解・反応ダイナミクス |
| 3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会 |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 甲斐健師, 小川達彦, 安部晋一郎, 佐藤達彦 |
| 2. 発表標題 PHITSにおける低エネルギー電子の飛跡構造計算機能の開発 |
| 3. 学会等名 第78回応用物理学会 |
| 4. 発表年 2017年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 甲斐健師, 小川達彦, 安部晋一郎, 佐藤達彦 |
| 2. 発表標題 PHITSにおける低エネルギー電子・陽電子の飛跡構造計算機能 |
| 3. 学会等名 第60回放射線化学討論会 |
| 4. 発表年 2017年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 甲斐健師, 樋川智洋, 鶴飼正敏, 藤井健太郎, 渡邊立子, 横谷明德 |
| 2. 発表標題 水中でエネルギー付与された電子の動的挙動 |
| 3. 学会等名 第60回放射線化学討論会 |
| 4. 発表年 2017年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 甲斐健師、米谷佳晃、横谷明德 |
| 2. 発表標題 放射線複雑DNA損傷を誘発する低エネルギー電子の役割：動的モンテカルロ計算解析 |
| 3. 学会等名 第73回日本物理学会 |
| 4. 発表年 2018年 |

| |
|--------------------------------|
| 1. 発表者名 甲斐健師、松谷悠佑、佐藤達彦 |
| 2. 発表標題 PHITSによる電子線トラック構造解析 |
| 3. 学会等名 第80回応用物理学会秋季学術講演会 |
| 4. 発表年 2019年 |

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

| | 氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号) | 所属研究機関・部局・職 (機関番号) | 備考 |
|-------|--|--|----|
| 連携研究者 | 佐藤 達彦 (SATO Tatsuhiko) (30354707) | 国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・原子力科学研究部門 原子力科学研究所 原子力基礎工学研究センター・研究主幹 (82110) | |
| 連携研究者 | 小川 達彦 (OGAWA Tatsuhiko) (20632847) | 国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・原子力科学研究部門 原子力科学研究所 原子力基礎工学研究センター・研究員 (82110) | |
| 連携研究者 | 安部 晋一郎 (ABE Shinichiro) (00727373) | 国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・原子力科学研究部門 原子力科学研究所 原子力基礎工学研究センター・研究員 (82110) | |