

研究種目：基盤研究 (C)

研究期間：2007～2010

課題番号：19500077

研究課題名 (和文) 重粒子線癌治療の原子分子レベルでの制御のためのデータベース化

研究課題名 (英文) Database for atomic level control of heavy particle therapy

研究代表者

鈴木 令子 (SUZUKI REIKO)

一橋大学・情報基盤センター・助手

研究者番号：70187780

研究代表者の専門分野：メディア情報学、原子・分子

科研費の分科・細目：情報学・メディア情報学・データベース

キーワード：電子移行過程・重粒子イオン・生体分子・分子解離・炭化水素分子

1. 研究計画の概要

(1) 重粒子イオンを生体分子と衝突させると、電荷移行、イオン化とその結果としての分子解離、及び直接分子解離過程など多様な非弾性散乱に起因する現象が観測され、これら1つずつの過程の詳細な知見と反応確率の知識が高精度・高効率のがん治療計画の基礎となっている。今までに数種類の生体関連分子を取り扱ってきたが、系の多くの電子状態が相互に強く結合する複雑さのために、当初多くの電子準位を考慮した計算を行うことが出来なかった。しかし、得られた計算結果を調べることで、さらに上の準位や見過ごされてきたが強く結合している準位を取り入れた大掛りな計算を実行しさらに詳細な知見を得る必要が判明した。本研究はCOなど特に重要な生体関連分子にさらに詳細に計算を拡張し総合的反應確率データを集積していくことを目的とする。

(2) さらに、炭化水素などは核融合炉内に不純物ガスとして多量に存在することが最近わかってきており、これら分子とプラズマ粒子 (H^+ , C^+ , ...) との衝突過程も核融合炉モデリングに重要となりこれらの反応確率も早急に必要とされている。また、様々なエネルギーを持ったイオンを固体表面と衝突相互作用させ、固体・薄膜の物性を制御したり改質したりする技術が、近年様々な応用分野で重要となってきている。最近の研究で、重粒子衝突過程で成功を収めた我々の取り扱い方法にもとづいた理論の拡張形が、イオンとクラスターや凝縮系の反応過程にも適用できることが示され、イオンとの相互作用を原子分子レベルで詳細に調べる可能性も出てきた。そこで表面系のポテンシャルを量子力

学的に計算し、それを基にして、表面に入射するイオンとの衝突過程を詳細に研究することを目的とする。

2. 研究の進捗状況

(1) すでに生体関連分子の (C_2H_4 , CH_2 , NH_3 , C_2H_6 , H_2O) を取り扱ってきたが、系の多くの電子状態が相互に強く結合する複雑さのために、当初多くの電子準位を考慮した計算を行うことが出来なかった。しかし、得られた計算結果を調べることで、さらに上の準位や見過ごされてきたが強く結合している準位を取り入れた大掛りな計算を実行しさらに詳細な知見を得る必要が判明した。そこで重要な生体関連分子にさらに詳細に計算を拡張し総合的反應確率データを集積している。

① (H^+CO)⁺ 系の断熱ポテンシャルおよびカップリングを分子の向きを様々に変化させた場合について量子化学計算で精密に決定した。さらにこのポテンシャルとカップリングを使い散乱過程の研究を行った。陽子衝突による標的分子からの電荷移行について散乱断面積を量子力学的緊密波法により計算し、イオン化及びその結果としての分子解離過程などの反応過程についての考察も行った。

② ($H+Cq$)⁺ 系については Buenker 教授のグループで断熱ポテンシャルを計算し、状態の検討を行っている。状態が複雑でカップリングの取り扱いについては MRD-CI による計算とは別の方法を検討している。

(2) イオンとクラスターや固体表面との衝突相互作用に関しては、3層に並べた72個のAl原子の上に吸着したNa原子で構成するクラスターモデルを考え、その静電ポテンシ

ルを量子化学プログラム (Gaussian) で計算することができた。このポテンシャルを用いて入射粒子を H^+ とした量子力学的緊密波法による計算が可能となり、衝突断面積の計算を行った。

3. 現在までの達成度

③ やや遅れている

(1) $(H+Cq)^+$ 系は状態が複雑で取り扱いが困難でありカップリングの計算が遅れている。実験値の一部存在する過程やエネルギー領域については補間する作業を実施し、理論値との詳細な比較検討を行っている。この実験理論合同の比較検討作業から最も信頼できるとされるそれぞれの過程についての反応確率の値を決定し、総合的反応確率データを集積している。

(2) 入射粒子 H^+ イオンとクラスター衝突相互作用の扱いにおいては、基底状態を用いた量子力学的緊密波法による計算を行ったが、励起状態の計算も望まれている。

4. 今後の研究の推進方策

さらに、収集したデータのデータベース化とそのライブラリー化を進める。同様の作業を医療関連分野のみでなく、出来るだけ汎用性の高いデータベースにするために材料関連や環境問題へ拡張すべきデータベースを構築するデータ収集を行うこととする。

さらに、炭化水素などは核融合炉内に不純物ガスとして多量に存在することが最近わかってきた。これら分子とプラズマ粒子 (H^+ , Cq^+ , ...) との衝突過程も核融合炉モデリングに重要となりこれらの反応確率も早急に必要とされているため、本研究課題で炭化水素分子の研究とデータベース化をさらに進める。

(1) 連携研究者であるピフルは、鈴木との計算と、初めに Buenker 教授、Stancil 教授らが先に行った Cq^+ 系のポテンシャルエネルギーを元にローゼンゼナ-型やランダウゼナ-型カップリングを用いて、分子の向きを固定してイオンを衝突させる分子散乱確率のデータを理論的に決定する。標的分子の励起状態への、電荷移行、イオン化及び分子解離過程などの反応過程について、それぞれ散乱断面積を量子力学的緊密波法により計算する。

(2) Al 原子の上に吸着した Na 原子と H^+ との量子力学的緊密波法による計算については励起状態を考慮に入れる必要があり、衝突断面積の計算プログラムの改良を行う。

5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 4 件)

- ① C.Y. Lin, P.C. Stancil, Y. Li, J.P. Gu, H.-P. Liebermann, R. J. Buenker, and M. Kimura, *Vibrationally resolved charge transfer for proton collisions with CO and H collisions with CO^+* , *Phys. Rev. A*, 76巻、2007、012702(1-9)
- ② M. Hoshino, L. Pichl, Y. Kanai, Y. Nakai, M. Kitajima, M. Kimura, Y. Li, H.-P. Liebermann, R. J. Buenker, H. Tanaka, and Y. Yamazaki, *Experimental and theoretical study of double-electron capture in collisions of slow $C^{4+}(1s^2\ ^1S)$ with $He(1s^2\ ^1S)$* , *Phys. Rev. A*, 75巻、2007、012716(1-6)
- ③ M. Kimura, T. Kusakabe, L. Pichl, A. Watanabe, R. Suzuki, D. Kato, *Plasma Spectroscopy in Dissociated Fragments Produced from Vibrationally Excited Molecules*, *NIFS Annual Reports*, April 2006_March 2007, 2008, p. 433

[学会発表] (計 1 件)

D. Kato, R. Suzuki, L. Pichl, H. P. Liebermann, R. J. Buenker, *Electron capture in collisions of CV with molecular hydrogen*, 19th International Toki Conference (ITC19), 2009年12月9日, 土岐市