

平成 30 年 5 月 31 日現在

機関番号：82502

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2013～2017

課題番号：25390131

研究課題名(和文) 粒子線照射での物理過程から化学過程への移行中の物理現象解明のための計算コード開発

研究課題名(英文) Development of calculation code for physical phenomenon elucidation on the way from physical to chemical processes in particle irradiation

研究代表者

森林 健悟 (MORIBAYASHI, Kengo)

国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構・関西光科学研究所 量子生命科学研究部・上席研究員(定常)

研究者番号：70354975

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)：重粒子線が細胞(主に水)に照射されたときの二次電子の運動のシミュレーション研究を行った。このシミュレーションでは、入射粒子線の軌道付近に生じる分子イオンが作る電場(トラックポテンシャル)の二次電子への影響を考慮した。シミュレーションによりトラックポテンシャルから脱出できる二次電子の確率をイオン衝突電離断面積の関数とした簡便式を導くことに成功した。この確率は観測値の傾向とほぼ一致した。さらに、トラックポテンシャルのこの影響を考慮した動径線量(重粒子の軌道からの距離の関数としての線量)の新しい分布の構築に成功した。この分布は入射粒子線の軌道付近で従来の分布よりも非常に大きくなる。

研究成果の概要(英文)：We executed a simulation study for the motion of secondary electrons in the irradiation of a heavy particle into a cell (main component is water). We incorporate the track potential affecting the motion of secondary electrons near the incident particle path into simulations. Here, the track potential is produced from the electric field of molecular ions created from this irradiation. In the motion of secondary electrons, we succeeded to derive a simple equation as a function of ion impact ionization cross sections for the probability of secondary electrons escaping the track potential. This probability agrees well with the trend of measurement data. Further, by considering this effect of the track potential, we also succeeded to develop new distributions for radial dose, which is the dose as a function of the distance from the heavy particle path. The distribution developed here shows larger dose than that in the conventional distribution near the incident particle path.

研究分野：重イオンビーム科学

キーワード：重イオンビーム シミュレーション 二次電子の運動 動径線量 トラックポテンシャル

1. 研究開始当初の背景

がん治療に用いられている重粒子線は高い治療効果を持つことで知られている。その理由の一つは DNA のナノメータ程度の領域に複数個の損傷をもつクラスターDNA 損傷を作るからと考えられているが、どのようにして作られるのかはよく分かっていない。この機構が分かれば、より高い治療効果をもつがん治療の実現につながる可能性がある。

治療効果が高い低エネルギーの重粒子線の場合、重粒子線の衝突電離で生じる分子イオンの集まりが作る電場(この電場が作るポテンシャルをトラックポテンシャルと呼ぶ)が大きくなり、コア(重粒子線の軌道付近)領域に二次電子(重粒子線衝突電離で発生した電子)の多くを束縛し、この領域のエネルギー付与を増大させる。この増大がクラスターDNA 損傷を多く発生させると考えた。そこで、重粒子線の線量の空間分布、すなわち、動径線量(入射重粒子線の軌道からの距離の関数としての線量)のコア領域のエネルギー付与の量を明らかにするためにトラックポテンシャルを考慮した二次電子の運動と動径線量のシミュレーション研究を行った。この二次電子がトラックポテンシャルに束縛され、エネルギー付与を起こす過程は物理過程終了から化学過程までの間起こり、化学過程に大きく影響する。

動径線量分布は、放医研と GSI で重粒子線がん治療の治療計画に使用されている。しかしながら、動径線量分布は治療計画に最も重要な領域であるコア領域では、シミュレーション、観測が行われておらず、科学的な根拠がないモデルが使用されている。普及されている動径線量は2種類あるが、2種類のコア領域の動径線量は大きな相違が見られる。

2. 研究の目的

最新のコンピューターを用いて従来のモデルよりも現実に近いシミュレーションモデルを構築する。このモデルから、(a)トラッ

クポテンシャル、トラックポテンシャルに束縛される二次電子の量及びエネルギーの総量を解析的に解明すると共に、(b)従来の動径線量分布の欠点を克服した新しい動径線量分布を提案する。

3. 研究の方法

トラックポテンシャルが二次電子の運動に影響を与える観測値が存在するにもかかわらず、従来のシミュレーションモデルでは知る限り、トラックポテンシャルを取り入れたものはなかった。そのため、従来のシミュレーションでは二次電子は入射粒子線の軌道から離れる一方であった。ここで開発したモデルでは遅い二次電子はトラックポテンシャルに束縛され、長い間、軌道付近でエネルギーを標的に付与する。

このシミュレーションを実行するために、(i)分子を液体密度になるように標的中に分布させ(従来のモデルでは標的は連続体が用いられた)、(ii)個々の分子に対して入射粒子による衝突過程を取り扱い、(iii)発生した個々の分子イオン、二次電子を別々に取り扱った。

我々のモデルを使用したシミュレーションは現在のスーパーコンピューターを使用しても1つのイオンに数週間の時間が掛かる。すなわち、従来のモデルを構築した1970-80年代のコンピューターで我々のモデル使用した場合、計算時間が掛かりすぎて研究にならないと考えることができる。

次に、モデルの具体的な手法のアルゴリズムを示す。(i) 標的を水とし、標的内に水分子の位置を決める。時間(t)及び二次電子の数(N_e)を0に設定する。(ii) 一個のイオンを標的内に入射させ、標的中を通過させる。

(iii) このイオンの水分子への衝突電離過程による水分子の状態の変化を調べ、(iv) 電離が起きた場合、水分子イオンと二次電子を生成させ、 $N_e = N_e + 1$ とし、(v) 二次電子の初期エネルギーと放出角度を決める。(vi) $N_e >$

0 のとき、電子衝突過程による水分子の状態の変化を調べる。(vii) 電離が起きた時、水分子イオンと電離電子を生成させ、 $N_e = N_e + 1$ とし、二次電子の初期エネルギーと放出角度を決める。(viii) 状態が変化した場合、その変化に応じて、この衝突に関わった二次電子のエネルギーを減らす。このエネルギー変化を線量シミュレーションに使用する。(ix) 入射粒子と二次電子を Δt 後の場所へ移動させる。その際、二次電子の速度は、分子イオンなどの電荷によるクーロン力を考慮して、変化させる。(x) $t = t + \Delta t$ として、手順 (iii) - (ix) を実行する。(xi) $t > t_{max}$ になったとき、イオンを別の場所に入射して (手順 (i) の水分子の配置を変えて)、(i) - (x) を実行する。

4. 研究成果

重粒子が照射されると標的中の分子が重粒子の軌道上で電離され、多くの分子イオンがトラックポテンシャルを形成する。図1にトラックポテンシャルを作る電場の強度を示す。この図から、この電場は σ_{ion}/r に比例することがわかった。ここで、 σ_{ion} 、 r は、それぞれイオン衝突電離断面積、入射粒子の軌道からの垂直距離を表す。点電荷が作る電場は、 $1/r^2$

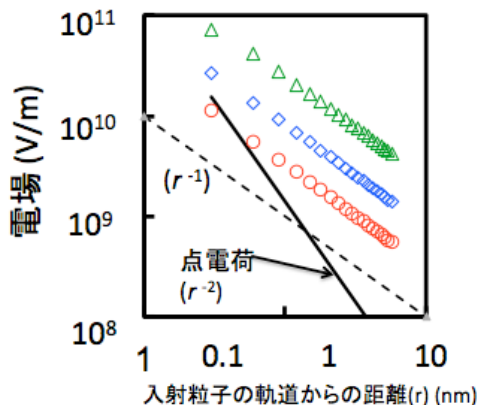


図1 σ_{ion} に対するトラックポテンシャルを形成する電場と r との関係： $\sigma_{ion} = 3 \times 10^{-15}$ (Δ), 10^{-15} (\diamond), 4×10^{-16} (\circ) cm^2 であり、点線は $1/r$ に比例する関数、実線は点電荷の電場 ($\propto 1/r^2$) を表す。

に比例するので、ここで生成した電場は、図1にしめされるように点電荷よりも長距離に作用することがわかった。この長距離力により遅い二次電子が容易にトラックポテンシャルに束縛されると考えることができる。

図2では σ_{ion} の関数としてのトラックポテンシャルからの脱出確率を示した。トラックポテンシャルを考慮した場合と無視した場合の $r \sim 10$ nm に二次電子が到着する数の比が脱出確率に相当する。ここで、 r は重イオンの軌道からの距離を表す。 $r \sim 10$ nm でトラックポテンシャルの効果はほぼなくなることは確認済みである。図1から、脱出確率は、ほぼ、 $\sqrt{\sigma_{ion}}$ に反比例することがわかった。さらに、この結果は、観測値 [Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B193, 661(2002)] の傾向と良い一致を示し、シミュレーションの正常に動作していることが検証できた。図2では、入射粒子のエネルギー (E_i) を 500 keV/u としたが、粒子のエネルギーが変わってもこの関係が成立することもわかった。

図3に入射粒子を重粒子線がん治療で使用されている炭素イオンとし、 $E_i = 3$ MeV/u、

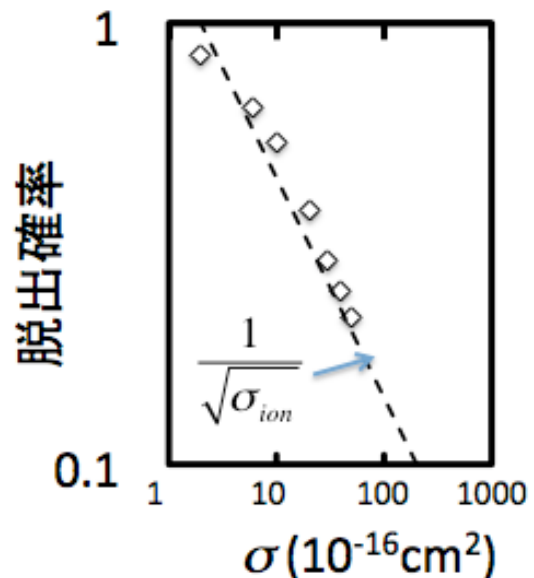


図2 $E_i = 500$ keV/u の入射粒子に対して σ_{ion} と二次電子のトラックポテンシャルからの脱出確率の関係： \diamond は、我々のシミュレーション結果、点線は $\sigma_{ion}^{-0.5}$ を表す。

15 MeV/u、 $t_{max}=100$ フェムト秒のときの動径線量と r との関係を示した。また、従来のシミュレーションモデルで計算した動径線量分布も示した。

r が大きな領域では、 E_i に関係なく 2 つの分布も良い一致を示した。従来の分布は、この領域では、観測値を再現しており、この領域で我々のシミュレーションが従来のモデルと良い一致を示したことから正常に動作していることを検証できた。

一方、 r が小さな領域で従来の分布との間に大きな相違が生じた。ここで開発したモデルと従来のモデルとの違いは、トラックポテンシャルを考慮したかしないかである。トラックポテンシャルが二次電子を束縛することは観測されており、トラックポテンシャルは考慮する必要がある。さらに、ここで開発したモデルは前述のように、観測値の傾向を再現することに成功している。すなわち、ここで開発したシミュレーションコードが正常に動作していることを検証できており、新しい分布関数を提案することに成功したと考えることができる。

$E_i=3$ MeV/u では、分子イオンなどの合成電場を考慮すると、動径線量は $r \sim 0$ 付近で、約 3 倍に増加する。すなわち、 E_i が小さいとき、多くの二次電子がトラックポテンシャルに捕獲され、これが動径線量に大きな影響を与えることを明らかにした。また、図には示さないが、 $t_{max}=50$ フェムト秒と 100 フェムト秒の結果の間でほとんど差がないことがわかり、 $t_{max}=100$ フェムト秒でほぼ収束していることもわかった。

$E_i=15$ MeV/u で示すように E_i が増加すると、トラックポテンシャルの影響は小さくなることがわかった。これは E_i が増えると σ_{ion} が小さくなり、その結果、図 1 で示したようにトラックポテンシャルを形成する電場が小さくなるためである。これにより、トラックポテンシャルによる二次電子の捕獲の起

きる頻度が減り、動径線量分布は、従来の分布に近づくと考えることができる。

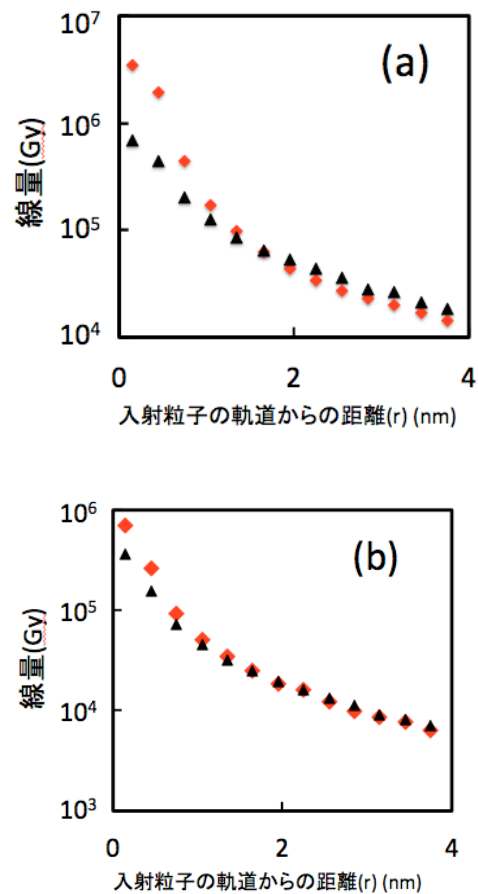


図 3 動径線量と炭素イオン [$E_i =$ (a)3MeV/u, (b) 15 MeV/u] の軌道からの距離 (r) との関係. 我々のシミュレーション結果 (◆) と従来のシミュレーション手法 (▲) から得た動径線量分布を示した.

5. 主な発表論文等 〔雑誌論文〕 (計 12 件)

- ① K. Moribayashi, 'Effect of the track potential on the motion and energy flow of secondary electrons created from heavy-ion irradiation' Radiat. Phys. Chem. 審査有, vol.146, 2018, pp.68-72
doi:10.1016/j.radphyschem.2018.01.017
- ② K. Moribayashi, 'Proposal for experiment systems using laser driven heavy ions and XFELs to understand physical phenomena occurring near the incident Ion Path',

- Proceedings of the 15th International Conference on X-ray lasers, 査読有, vol.202, 2018, pp. 121 -123
doi:10.1007/978-3-319-73025-7_19
- ③ K. Moribayashi, 'Simple formulas for heavy-ion-irradiation-induced electric field', Nucl. Instru. Methods Phys. Res. B, 審査有, vol.408, 2017, pp.241 – 243
doi:10.1016/j.nimb.2017.04.088
- ④ K. Moribayashi, 'Effect of track potentials on the movement of secondary electrons due to irradiation of heavy ions', J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, vol.86, 2017, pp.024301/1-6
doi:10.7566/JPSJ.86.024301
- ⑤ K. Moribayashi, 'Effect of recombination between a molecular ion and an electron on radial dose in the irradiation of a heavy ion', Appl. Phys. Res. 査読有 vol.8, 2016, pp.138–148
doi:10.5539/apr.v8n1p138
- ⑥ K. Moribayashi, 'Development of the radial dose distribution function relevant to the treatment planning system for heavy particle cancer therapy', Phys. Scr. 査読有 vol.90, 2015, pp. 054013/1-5
doi:10.1088/0031-8949/90/5/054013
- ⑦ K. Moribayashi, 'Simulation study of radial dose due to the irradiation of a swift heavy ion aiming to advance the treatment planning system for heavy particle cancer therapy: the effect of emission angles of secondary electrons', Nucl. Instru. Methods Phys. Res. B, 査読有 vol.365, 2015, pp.592 – 595
doi: 10.1016/j.nimb.2015.10.028
- ⑧ K. Moribayashi, 'Radial dose calculation due to the irradiation of a heavy ion: Role of composite electric field formed from the polarization of molecules and molecular ions', Rad. Phys. Chem. 査読有, vol.96, 2014, pp.211-216
doi: 10.1016/j.radphyschem.2013.09.016
- ⑨ 森林健悟, 「解説 重粒子線の動径線量」原子衝突学会誌「しょうとつ」、査読有、第 11 巻 2014, 73 – 91 ページ
http://www.atomiccollision.jp/collision/syouto/tsu/14_1103s.pdf
- ⑩ K. Moribayashi, 'Relaxation of Plasma Created from Irradiation of a Heavy Ion', JPS Conference Proceedings, 審査有, vol.1, 2014, pp. 013089/1-4
<https://journals.jps.jp/doi/abs/10.7566/JPSCP.1.013089>
- ⑪ K. Moribayashi, 'Movement of secondary electrons due to the irradiation of heavy ions: Role of the composite electric field formed from the polarization of molecules and molecular ions', Rad. Phys. Chem. 査読有 vol.85, 2013, pp.36 – 41
doi:10.1016/j.radphyschem.2012.10.015
- ⑫ K. Moribayashi, 'Demonstrations for the effect of composite electric fields of molecular ions on the motion of secondary electrons due to ion irradiation,' Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B, 査読有 vol.314, 2013, pp. 30 – 33
doi: 10.1016/j.nimb.2013.05.049
[学会発表] (計 15 件)
- ① 森林 健悟 「XFEL を用いた高強度レーザー駆動重イオン照射の物理現象の観測法の提案」、日本物理学会第 73 回年次大会, 2018 年
- ② 森林 健悟 「重イオン照射によるプラズマ生成モデルのクラスターイオンへの応用」、TIA 連携プログラム探索推進事業シンポジウム: 準相対論的巨大大クラスターイオンビームが拓く世界、2017 年
- ③ K. Moribayashi, 'Role of ion impact ionization cross sections in the irradiation of swift heavy ions into condensed matter, International

Conference on Photonics, Electronic and Atomic Collisions, 2017 年

- ④ 森林 健悟 「重イオンの軌道付近で生成するナノプラズマ中の電子の総エネルギー」、日本物理学会 2017 年秋季大会, 2017 年
- ⑤ 森林 健悟 「高強度場科学の分野からの重イオンビーム科学研究へのアプローチ」、レーザー学会第 37 回年次大会, 2017 年
- ⑥ K. Moribayashi, 'simulation study for the motion of secondary electrons into materials', IUMAR-ICAM 2017, 2017 年
- ⑦ 森林 健悟, 「重イオンビームが生成するナノメータサイズプラズマの粒子シミュレーション」、プラズマ科学における分光計測の高度化と原子分子過程研究の新展開研究会, 2016 年
- ⑧ K.Moribayashi, 'Simulation study for the effect of track potentials on the movement of secondary electrons due to highly charged ion irradiation' 18th International Conference of Highly Charged Ions, 2016 年
- ⑨ K.Moribayashi, 'Simulation study of radial dose due to the irradiation of a swift heavy ion aiming to advance the treatment planning system for heavy particle cancer therapy', International Conference on Swift Heavy Ion with Materials, 2015 年
- ⑩ 森林 健悟, 「短パルス X 線を用いた重イオンビーム照射の影響の観測法の提案」、レーザー励起 X 線源とその応用研究会, 2015 年
- ⑪ K.Moribayashi, 'New simulation model for radial dose relevant to the treatment planning system for heavy particle cancer therapy', 9th International Conference on Atomic and Molecular Data, 2014 年
- ⑫ K. Moribaayshi, 'Atomic Collision Physics Relevant to the treatment planning system for heavy particle therapy', 原子衝突学会, 2014 年

⑬ 森林 健悟, 「重粒子線照射による標的分子の運動」、日本物理学会 2014 年秋季大会, 2014 年

⑭ 森林 健悟, 「新規モデル：イオンビームで生じる電場の DNA 損傷への効果」、第 8 回高崎量子応用研究シンポジウム, 2013 年

⑮ 森林 健悟, 「重粒子線で生成するプラズマ中での再結合の役割」、日本物理学会 2013 年秋季大会, 2013 年

6. 研究組織

(1) 研究代表者

森林 健悟 (MORIBAYASHI, Kengo)

国立研究開発法人 量子科学技術研究開発機構・関西光科学研究所 量子生命科学研究所・上席研究員 (定常)

研究者番号 : 70354975