

重离子径迹结构的 Monte Carlo 计算模型*

李 强 卫增泉 马受武

(中国科学院近代物理研究所 兰州 730000)

摘 要 阐述了一种称之为分段连续减慢近似的方法,建立了新的计算重离子在等效生物组织—液态水中径迹结构及能量沉积分布的 Monte Carlo 计算模型,目的在于建立细胞损伤强度和损伤范围与重离子参量之间的关系,从理论上探索重离子生物效应的机理.

关键词 重离子 径迹结构 Monte Carlo 分段连续减慢近似

1 引 言

重离子生物效应的研究已开展了多年,但重离子生物效应机理的理论研究目前还刚起步,而描述辐射的质和量的传统方法,如传能线密度 LET,已不能充分表述重离子辐射所产生的各种效应,这就需要对重离子在生物组织中复杂的径迹结构进行研究和分析.因此人们对重离子的径迹结构和与径迹有关系的物理量的研究,理论上和实验上都相当重视,以期最终阐明重离子辐射效应的机理和建立相应的模型.基于此目的,提出了一种重离子径迹结构 Monte Carlo 计算模型,对重离子在等效生物组织——液态水中的能量沉积及径迹结构进行了研究.

2 模 型

2.1 等效生物组织的选取

生物组织中活细胞最主要成份便是水,大多数生物含有的水分约占鲜重的 (80~95)%. 生物组织中水分子紧密挤满在纤维状蛋白与球状蛋白之间,呈现非常整齐的状态,这便是细胞中的结合水.这种水分子的整齐状态的形成和破坏与细胞中原生质的物理性质的改变有密切的关系,也与细胞的功能联结在一起;而细胞中绝大部分水分处于游离状态,称之为游离水,可作为细胞中代谢产

物相互反应的溶剂.因此可以肯定地说,不能再把水简单地看作是填充在细胞结构分子空间中的一种无活力的介质,水与细胞内的有机物质形成了一种分不开的单位 and 体系,它决定了组织内细胞的结构与功能^[1].由此可见,液态水不仅是生物组织中活细胞的主要成分,而且电离辐射对水分子产生的辐射效应将会对生物组织的结构与功能产生深远的影响,因而我们选取液态水为等效生物组织.

2.2 模型建立

重离子在液态水中的能量沉积过程包括:重离子本身与水分子的相互作用和重离子与水分子的相互作用中产生的次级粒子的能量沉积过程.在中高能重离子能区,重离子与水分子的相互作用主要是发射次级电子(δ 电子).基于这样的事实,对荷能重离子与水分子的相互作用采用了分段连续减慢近似,这主要考虑重离子使水分子的电离而发射 δ 电子,忽略重离子本身使水分子激发等过程的能量沉积.在每一个重离子径迹片段内,采用修正了的二体碰撞近似理论,得到了 δ 电子的二次发射微分截面 $d^2\sigma/dE d\Omega$,并根据该发射截面对 δ 电子的能量及发射方向进行了随机抽样,进而对 δ 电子进行逐事件的 Monte Carlo 跟踪,直到其能量低于截止阈值之下,记录每一相互作用点的几何坐标、能量沉积、能量转移和相互作用事件的类型等人

* 中国科学院八五重点资助课题.
1994-10-30 收稿.

们感兴趣的量，供理论分析所用。

从经典力学观点考虑，当入射重离子与靶原子或分子核外束缚电子发生正碰时，重离子转移给束缚电子的能量 ΔE 最大，为

$$\Delta E_{\max} = 2m_e \beta^2 c^2 \quad (1)$$

式中， $\beta = V_p/c$ ， c 为光速， V_p 为重离子速度， m_e 是电子质量，即碰撞中发射 δ 电子的最大能量 E_{\max} 为

$$E_{\max} = \Delta E_{\max} - \bar{I} = 2m_e \beta^2 c^2 - \bar{I} \quad (2)$$

式中， \bar{I} 为重离子使靶物质发生电离的平均电离能。实际上由于靶核也参与了重离子与核外电子的碰撞过程，使得重离子在碰撞过程中的最大能量损失会大于 $2m_e \beta^2 c^2$ 。已有实验证实，发射能量大于 $2m_e \beta^2 c^2$ 的 δ 电子的截面非常小^[2]。因此，在 Monte Carlo 计算过程中，认为重离子与靶物质的相互作用过程中最大能量转移为 $2m_e \beta^2 c^2$ 。在所考虑的重离子能量范围内（重离子比能 $E \geq 0.1 \text{ MeV/u}$ ）有

$$\Delta E_{\max} = 2m_e \beta^2 c^2 = \frac{4m_e}{m_p} (AE) \quad (3)$$

式中， m_p 为重离子质量， A 为重离子的质量数。当 $m_e \ll m_p$ 时，故有

$$\Delta E_{\max} \ll AE \quad (4)$$

考虑了方程 (3) 和 (4) 后

$$\frac{AE - \Delta E_{\max}}{AE} \approx 1 \quad (5)$$

所以即使考虑了每次碰撞中重离子以最大能量 ΔE_{\max} 转移给束缚电子，荷能重离子与靶原子或分子核外束缚电子相互作用而发射 δ 电子的前后能量变化并不显著。有理由认为，相互作用前后，重离子的能量近似不变。由于重离子质量 m_p 远大于电子质量 m_e ，因此重离子与靶核外束缚电子发生能量交换后其运动方向并不显著变化，这样就可以认为重离子径迹是一条准直线。基于上面这两方面的考虑，把重离子径迹 L 划分为若干个较小的片段 l_i ，便有

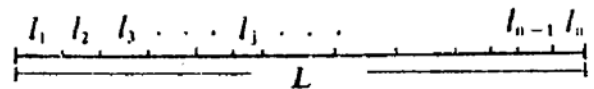
$$\sum_{i=1}^n l_i = L \quad (6)$$

如图所示，并认为重离子在其径迹的这些小

片段上能量 E_i 保持不变，即在径迹片段 l_i ($i = 1, 2, 3 \dots n$) 上， E_i 保持为常数，而重离子在下一个径迹片段 l_{i+1} 上的能量 E_{i+1} 等于径迹片段 l_i 上的能量 E_i 减去重离子在 l_i 上与束缚电子相互作用而发生能量转移 $\Delta E_{i,j}$ 之和，即

$$E_{i+1} = E_i - \sum_j \Delta E_{i,j} \quad (7)$$

其中， $i = 1, 2, 3 \dots, n-1$ 。在此假设下，重离子在某个径迹片段上发射某一能量为 T 的 δ 电子的截面 $d\sigma_i/dT$ 为一常数（因为 $d\sigma_i/dT$ 是重离子能量 E_i 的函数），这样就可逐片段研究重离子径迹结构及能量沉积，然后将各片段的研究结果相叠加，就可得到整个重离子在生物组织中的径迹结构。出于实际考虑，应将重离子径迹划分的越小越好，而且越是接近重离子射程末端，径迹片段更应划分的越小越好，这是因为重离子在接近其射程末端时，单位路程上的能量损失很大（Bragg 峰），也即重离子能量变化很大。当然重离子能量处于低能区时，与靶物质相互作用过程中的其它次级效应如级联离子的产生、软 X 射线的发射、热效应等都将变的有用了，因此在低能区时也应将这些效应考虑在内。这就是所称的分段连续减慢近似，它的引入为研究重离子本身在液态水中的运动带来了方便。



图示 重离子径迹 L 及其被划分的径迹片段 l_j ($j = 1 \dots n$)

对于重离子与液态水相互作用中产生的 δ 电子（次级电子）在液态水中的传输慢化过程，主要考虑了电子与水分子的弹性散射，以水分子的 6 种电离产物区分的 6 种电离和水分子中氧原子的内壳层电离以及水分子的 6 种类型的激发，其中包括了凝聚态物质的特征激发类型——等离子体集体激发态 (Plas-

mon)^[3]. 以电子这 14 种事件的截面进行随机抽样, 进行全径迹 Monte Carlo 跟踪. 考虑到 δ 电子的产生和传输过程是两个独立的过程^[4], 因此应侧重把 δ 电子的发射过程和其传输过程分离. 这样的好处在于, 可把电子传输部分理论结果与目前的有关电子径迹结构及能量沉积、电子传输等的实验结果或其它计算结果进行比较, 以验证理论计算的合理性和可靠性, 这些可比较的量主要有电子的射程、次级电子产额、 W 值、深部剂量分布及径向剂量分布等.

3 讨 论

基于上述的 Monte Carlo 模型, 设计了 Monte Carlo 计算程序, 它主要包括两个不同的部分: 第一部分是随着荷能重离子穿越液态水介质产生重离子径迹, 包括重离子本身的径迹和次级电子的径迹, 产生每一相互作用的几何坐标、能量沉积和相互作用事件的

类型; 第二部分是分析这些重离子径迹数据, 得到在辐射生物学应用上感兴趣的量, 如径向剂量分布和细胞失活截面等, 显然程序的第一部分, 即重离子径迹的产生部分, 是工作中的主干, 它包括了重离子径迹的所有物理特征.

重离子 Monte Carlo 计算模型的建立, 有助于研究重离子在三维空间的径迹结构和能量沉积分布, 得到人们所关注的重离子作用范围和剂量空间分布, 对从理论上指导重离子辐射生物效应的研究、离子束育种、放射治疗、辐射防护等大有益处.

参 考 文 献

- 1 郑国昌. 细胞生物学, 高等教育出版社, 1992
- 2 Rudd M E, et al. Rev. Mod. Phys., 1992, 64: 441
- 3 Kaplan I G, et al. Radiat. Res., 1991, 127: 1
- 4 Paretake H G. Proc. 4th Symposium on Microdosimetry, Verbania, Pallanza, Italy, 1973, 145

Monte Carlo of Heavy Ion Track Structure Calculation

Li Qiang Wei Zengquan Ma Shouwu

(Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730000)

Abstract A method called segmented continuous slow down approximation is explained, and a model of heavy ion track structure calculation in equivalent biological tissue-liquid water by means of Monte Carlo is built up. It aims at establishing relations between lesion intensity and range of cells and heavy ion parameters and investigating biological effect mechanism by heavy ions in theory.

Key Words heavy ion track structure Monte Carlo segmented continuous slow down approximation