

文章编号: 1007-4627(2007)02-0138-04

重离子生物分子作用中的电子能损^{*}

朱宝珠^{1, 2, 3}, 张丰收^{1, 2, 4, #}, 王志萍^{1, 2}, 顾斌^{1, 2}, 周宏余^{1, 2}

(1 北京师范大学射线束技术与材料改性教育部重点实验室,

北京师范大学低能核物理研究所和材料科学与工程系, 北京 100875;

2 北京市辐射中心, 北京 100875;

3 新疆大学物理系, 新疆 乌鲁木齐 830046;

4 兰州重离子加速器国家实验室原子核理论中心, 甘肃 兰州 730000)

摘要: 对重离子与生物分子相互作用中能量损失的物理机制进行了分析和讨论, 对现有电子能量损失的研究进展进行了评述, 指出将要研究的方向。

关键词: 重离子; 能量损失; 电子阻止; 核阻止

中图分类号: O571.6; Q7 **文献标识码:** A

德国物理学家伦琴在 1895 年发现了一种具有高穿透本领的新射线——X 射线, 1896 年 Freund 首次把 X 射线用于疾病治疗(生物组织的辐照), 研究 X 射线与生物分子相互作用, 继而奠定了放射生物学和放射医学的基础。目前人们已开展了 X 射线、 γ 射线、电子、中子、 π 介子对生物组织的辐照研究^[1-3] 和质子、重离子对生物组织的辐照研究^[4]。重离子束与生物分子相互作用的特点之一就是其独特的倒转深度剂量分布, 即在离子入射通道有一个低剂量的坪区, 而在接近离子射程末端时出现一个高剂量的 Bragg 峰区^[5]。重离子和其它的辐射粒子相比有其独特的优势: 具有高的传能线密度(LET), 会导致高的相对生物学效应(RBE), 细胞存活率低, DNA 双链断裂几率大而因此修复效应减小, 较低的氧效应, 细胞周期各时相辐照敏感性的差别减小, 以及操作中较少的分次治疗方案对正常组织损伤极少, 能够进行正电子发射断层成像术(PET) 的在线观测等^[6]。正是由于重离子辐射的这些特点, 近年来重离子治疗癌症、重离子辐照培育新品种得到普遍重视。

重离子与生物分子相互作用可分为物理过程、化学过程和生物过程。物理过程主要由不同层次物质相互作用、激发以及所导致生物分子结构的变化

所致, 包括: (1)核相互作用, 作用时间为 10^{-22} s; (2)库仑相互作用, 即相互作用分子的电离和电子激发, 作用时间为 10^{-15} s; (3)生物分子与周围环境相互作用, 即生物分子振动能量和相位的弛豫, 作用时间为 10^{-12} s。最终导致生物分子新结构的形成。经过这 3 个过程, 具有一定能量(能量可以从热运动能量到几个 GeV)的入射重离子, 在与靶生物分子相互作用中, 逐步损失能量, 最终停止在靶中。在传统理论中, 这种能量损失过程分为核阻止和电子阻止, 分别对应低能和较高能量的情况。但在实际发生的重离子辐照中, 重离子的入射能量可以从热能量到几个 GeV, 现有模型遇到困难。例如, 在 200 keV 的 V^+ 离子辐照花生时, V^+ 的穿透深度可以达到 1 mm, 这用现有模型难以解释; 用几百 MeV/u 的碳离子辐照水溶液时, 碳离子与氧原子核、氢原子作用时, 会发生原子核碎裂现象, 产生从氢到碳(电荷 $Z=1-6$)次级核素, 现有的重离子辐照模型还没有考虑碎裂贡献。另外, 需要强调的是, 在能量较高时, 核阻止和电子阻止是关联的, 需要处理离子-电子关联动力学, 这其实也是凝聚态物理研究的前沿问题之一。

本文主要从离子与生物分子相互作用的微观动力学理论出发, 通过和现有研究电子能损理论模型

* 收稿日期: 2007-01-08; 修改日期: 2007-03-12

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10575012, 10435020); 北京市教育委员会共建项目建设计划资助项目(XK100270454)

作者简介: 朱宝珠(1983—), 男(汉族), 河南开封人, 硕士研究生, 从事离子与生物分子相互作用研究。

通讯联系人: 张丰收, E-mail: fszhang@bnu.edu.cn

的分析比较, 对现有电子能量损失的研究进展进行评述, 指出将要研究的方向。对核能损、核能损与电子能损关联的问题的讨论将在其它地方给出。

首先看高能时(大于 1 MeV)的情况。对高能带电离子在物质中的电子能量损失的研究早在 20 世纪 30 年代就开始了。Bethe^[7] 和 Bloch^[8] 首先采用量子力学的微扰理论描述高速带电粒子与固体中原子的非弹性碰撞过程, 在一阶 Born 近似下, 得到了著名的 Bethe-Bloch (BB) 公式。20 世纪 60 年代左右, Lindhard 等人将固体中的电子成分看成是一个均匀的电子气, 采用线性介电理论描述带电粒子与电子气的相互作用过程, 并给出了电子阻止本领的一般表示式。到了 80 年代以后, Echenique 等人采用非线性密度泛函的方法计算了电子阻止本领^[9-11]。尽管在过去几十年关于带电粒子在物质中电子阻止本领的理论研究已取得了较大的进展, 但是在这些研究中, 总是采用这样或那样的近似。另外, 在研究带电粒子与注入生物材料中, 运用 BB 公式得到的理论值与实验所得的数据相差很大。

在高能情况下计算电子能量损失时, 其能量损失主要用于激发或电离靶原子核外的电子, 在一阶 Born 近似下, 得到高速带电粒子在固体中电子阻止本领的 BB 公式为

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} N Z_2 \ln\left(\frac{2mv^2}{I}\right), \quad (1)$$

其中, v 是入射粒子的速度, N 是固体的原子密度, Z_1 和 Z_2 分别是入射离子与靶原子的电荷, m 为电子的质量, I 为靶原子的核外电子的平均激发能或电离能。从上式看出, 电子阻止本领正比于入射粒子电荷数 Z_1 的平方。也就是说, 无论对于正离子还是负离子, 用 BB 公式给出的电子阻止本领都相同。Fano 对 BB 公式进行了各种展开^[12-15], 得到描述 BB 公式的相对论和其它修正:

$$S = -\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi e^4 Z_2}{mv^2} Z_1^2 \left[\ln\left(\frac{2mv^2}{I}\right) + \ln\left(\frac{l}{l-\beta^2}\right) - \beta^2 - \frac{C}{Z_2} - \frac{\delta}{2} \right], \quad (2)$$

式中, $\beta=v/c$, C/Z_2 为壳层修正, $\delta/2$ 为密度效应修正。若令

$$f(\beta) \equiv \ln\left(\frac{2mc^2\beta^2}{1-\beta^2}\right) - \beta^2,$$

$$\kappa = 4\pi a_0^2 mc^2,$$

其中 $a_0^2 \equiv e^2/mc^2$ 是 Bohr 半径, 方程简化为

$$S = \frac{\kappa Z_2}{\beta^2} Z_1^2 \left[f(\beta) - \ln I - \frac{C}{Z_2} - \frac{\delta}{2} \right], \quad (3)$$

则 BB 公式的一般表述为

$$S = \frac{\kappa Z_2}{\beta^2} Z_1^2 L(\beta),$$

$$L(\beta) = L_0(\beta) + Z_1 L_1(\beta) + Z_1^2 L_2(\beta) \dots. \quad (4)$$

对于方程(4)来说, 方程右边第 1 项是 BB 公式, 第 2 项是 $L_1(\beta)$ 通常称为 Barkas 效应或者 Z_1^3 效应^[16], 而方程的第 3 项称为 Bloch 修正或者 Z_1^4 效应。对方程(4)右边几项的物理意义讨论如下:

基本项 $L_0 = f(\beta) - C/Z_2 - \ln I - \delta/2$, 其中 C/Z_2 为壳层修正。假设粒子的速度远大于靶电子速度, 壳层修正就是一个比较大的修正, 对于质子阻止本领在能量范围 1—100 MeV 时, 最大的修正大约是 10%。修正要求粒子速度远大于束缚电子的速度。 $\ln I$ 为平均激发能修正。从理论上讲, 要涉及到靶原子的本征函数和本征值。密度效应修正 $\delta/2$, 在高能时, 相同能量的入射粒子, 在不同浓度溶液中的阻止射程是不同的, 这种现象称为密度效应。只有当粒子的动能超过静止质量时, 这种现象才会变得重要^[17]。

Barkas 修正 L_1 及更高级修正。在 10 MeV 的质子注入银实验时, 不同项的贡献关系是 $L_0 \approx 98.8\%$, $Z_1 L_1 \approx 1.1\%$, $Z_1^2 L_2 \approx 0.1\%$ 。然而, 有一些特殊的情况, 高次幂变得更重要^[18]。Ashley 等^[19-21]首先给出了非相对论形式的阻止能量 Barkas 修正的计算, Medenwaldt 等后来对其进行了修正, 得到了反质子在硅中阻止本领的实验支持^[22]。在高能量(超过 10 MeV/u) Barkas 效应变得不重要。在低能量(小于 0.6 MeV/u) 离子将捕获电子, 引起电荷部分屏蔽效应, 导致在粒子/靶相互作用中靶极化效应被遮蔽。在低能量($\ll 1$ MeV/u), 在实验中分离出 Barkas 效应是很困难的。对于高能的离子, 虽然有很多人对于 BB 公式进行修正, 但至今为止还没有一个完整的理论来研究和讨论 Barkas 效应, 也一直没有给出在量子理论框架下的 Barkas 效应的具体形式。

其次, 对低能时(小于 200 keV)的情况, 首先

讨论低能带电离子的电子阻止本领的散射理论。在(1)式给出的电子阻止本领中,没有考虑束缚电子的壳层分布。为此,近年来 Echenique 等人给出了一种建立在非线性密度泛函基础之上的量子散射理论描述。由于离子的质量远大于电子的质量,可以认为离子近似不动,而电子气中的电子在离子产生的势场 $V(r)$ 中散射。设入射离子的速度小于电子气的 Fermi 速度,可以认为离子与电子气中电子之间的相互作用是弹性的散射过程,入射离子的能量损失主要用于电子气中散射电子的动能增加。除了微观理论,下面讨论半唯象理论:即 Firsov 理论和 Lindhard-Scharff(LS)理论。在 Firsov 的理论模型中,认为当入射离子的速度 v 小于固体中电子气的 Fermi 速度 v_F 时,不可能对固体中的电子气造成明显的激发,其能量损失主要通过它同固体中的原子之间的电子传输引起的。在 1996 年, Lindhard 和 Scharff 两人采用原子的 Thomas-Fermi(TF)模型,给出了如下形式的低速离子($v < v_0 Z_1^{2/3}$)的电子阻止本领

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e = 8\pi e^2 a_B N Z_2 Z_1^{7/6} (Z_1^{2/3} + Z_2^{3/2})^{-3/2} \frac{v}{v_F}。 \quad (5)$$

该公式给出的结果能与大多数实验符合得较好,已被广泛地使用。

对于 200 keV—1 MeV 之间能区,电子阻止截面采用 Biersach 的插值计算方法得到:

$$\frac{1}{S} = \frac{1}{S_{LS}} + \frac{1}{S_{BB}}， \quad (6)$$

其中 S_{LS} 和 S_{BB} 分别是 LS 公式和 BB 公式的计算值,但实际计算中会出现不连续点。对于中能电子阻止本领可以通过连接函数(Switch Function)来表示,

$$S = S_L U + S_H (1 - U)， \quad (7)$$

其中 U 为连接函数:

$$U = C_0 + C_1 \frac{E - E_L}{E_H - E_L} + C_2 \left(\frac{E - E_L}{E_H - E_L}\right)^2 + C_3 \left(\frac{E - E_L}{E_H - E_L}\right)^3 + C_4 \left(\frac{E - E_L}{E_H - E_L}\right)^4 + C_5 \left(\frac{E - E_L}{E_H - E_L}\right)^5， \quad (8)$$

其中 C_0, C_1, C_2, C_3, C_4 和 C_5 之值分别是 0, 0, 0, 10, -15 和 6, 这足以保证体系能量守恒和其一阶导数连续。图 1 给出了能量从 100 eV 到 300 MeV

的 He 离子在硅中的电子阻止本领。虚线是 LS 公式计算的结果,可以看出其适合低能的情况;点线是 BB 公式计算的结果,可以看出其适合在高能时的情况,两者都不能合理地给出中等能量时电子阻止本领。对中等能量,用 Biersach 内差给出的电子阻止本领(点划线)出现不连续,而采用我们提出的连接函数方法(实线)可以给出和 ICRU49 一致的结果,说明我们的方法是合理的。

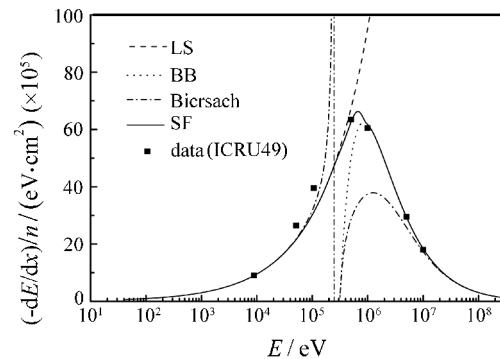


图 1 He 离子在硅中的电子阻止本领(n 为原子密度)

总之,目前虽然对离子生物效应有一些认识,也得到一些离子在生物组织中的分布规律,但缺乏系统性,这对于生物育种和重离子治疗癌症有重要意义。本文仅讨论了重离子与生物分子相互作用中电子阻止本领的现有模型和结果,对极低能(例如,热动能)的重离子与生物分子相互作用中截面增强、对原子核碎裂的贡献等问题没有讨论,对核阻止本领、核能损和核电子能损关联的问题将在以后工作中给出。

参考文献(References):

- [1] Xia Shouxuan, Ed. Radiobiology. Beijing: Military Medicine Science Press, 1998, 1—100(in Chinese).
(夏寿萱主编. 放射生物学. 北京: 军事医学科学出版社, 1998, 1—100.)
- [2] Zhang Fengshou. Nuclear Physics Review, 2005, **22**(4): 373
(in Chinese).
(张丰收. 原子核物理评论, 2005, **22**(4): 373.)
- [3] Kraft G. Prog Part Nucl Phys, 2000, **45**: S473.
- [4] Wilson W E. Biophys, 1999, **38**: 97.
- [5] Bragg W, Kleemann R. Phil Mag, 1905, **10**: 318.
- [6] Zhang Fengshou. Nuclear Physics Review, 2006, **23**(1): 23
(in Chinese).
(张丰收, 原子核物理评论, 2006, **23**(1): 23.)

- [7] Bethe H. Ann Physik, 1930, **5**: 324.
- [8] Bloch F. Ann Physik, 1933, **16**: 285.
- [9] Echenique P M. Euro J Phys, 1982, **13**(1): 25.
- [10] Nunez R. J Phys, 1980, **C13**(22): 4 229.
- [11] Barberan N. J Phys, 1986, **B19**(3): L81.
- [12] Fano U. Annu Rev Nucl Sci, 1963, **13**: 1.
- [13] Fano U. Phys Rev, 1947, **72**: 26.
- [14] Fano U. Phys Rev, 1956, **102**: 385.
- [15] Fano U. Phys Rev, 1956, **103**: 1 202.
- [16] Mikkelsen H, Esbensen H, Sigmund P. Nucl Instr and Meth, 1990, **B48**: 8.
- [17] Ziegler J F. Phys Rev, 1999, **A85**: 1 249.
- [18] Sigmund P. Advances in Quantum Chemistry, 2005, **48**: 7.
- [19] Ashley J C, Ritchie R H, Brandt W. Phys Rev, 1972, **B5**: 2 393.
- [20] Ashley J C, Ritchie R H, Brandt W. Phys Rev, 1973, **A8**: 2 404.
- [21] Ashley J C, Anderson V E, Ritchie R H, et al. Document 021195. New York: National Auxiliary Publication Service, 1974, 150—200.
- [22] Medenwaldt R, Moller S P, Uggerhoj E, et al. Nucl Instr and Meth, 1991, **B58**: 1.
- [23] ICRU49: www-nds.iaea.or.at/stoppinggraphs.

Electronic Energy Loss in Heavy Ion-biomolecule Interaction^{*}

ZHU Bao-zhu^{1, 2, 3}, ZHANG Feng-shou^{1, 2, 4, #}, WANG Zhi-ping^{1, 2}, GU Bin^{1, 2}, ZHOU Hong-yu^{1, 2}

(1 Key Laboratory of Beam Technology and Material Modification of Ministry of Education;

Institute of Low Energy Nuclear Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China;

2 Beijing Radiation Center, Beijing 100875, China;

3 Department of Physics, Xinjiang University, Urumqi 830046, China;

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

Abstract: The mechanisms of energy loss in the process of heavy ion interaction with biomolecule are analyzed and discussed, the recent related research progresses are reviewed and some future research directions are indicated.

Key words: heavy ion; energy loss; electronic stopping; nuclear stopping

* Received date: 8 Jun. 2007; Revised date: 12 Mar. 2007

Foundation item: National Natural Science Foundation of China (10575012, 10435020); Joint Science Foundation of Education Committee of Beijing City(XK100270454)

Corresponding author: Zhang fengshou, E-mail: fszhang@bnu.edu.cn