

低能电子径迹中能量沉积频率分布^{*}

李 强 卫增泉 马受武

(中国科学院近代物理研究所 兰州 730000)

1994-12-03 收稿

摘 要

根据我们建立的径迹结构 Monte Carlo 计算模型, 计算了低能电子在液态水中径迹范围内 DNA 分子片段模型和染色质丝片段模型区域内的能量沉积频率分布, 结果与 OREC 和 CPA 程序结果进行了比较, 这些计算结果为解释低能重离子注入生物体造成深部生物效应而提出的一种物理机制——软 X 射线机制提供了理论依据.

关键词 低能电子, DNA 分子片段模型, 染色质丝片段模型, 能量沉积频率.

1 引 言

当今国外开展的重离子生物效应的研究, 集中在中高能重离子能区; 而国内这方面的研究集中在低能重离子能区, 并且已用低能重离子注入生物体获得了损伤轻、突变率高、突变谱广的统计结果^[1]. 用高、中、低能重离子束作辐射源, 荷能重离子与生物体的能量、动量转移过程中都会以一定的几率发射次级电子. 对于中高能重离子, 已有资料^[2]表明, 细胞中的生物大分子如遗传物质 DNA 分子化学键的断裂大约有 90% 以上是由重离子入射到生物体中产生的次级电子造成的, 而恰恰这些电子的能量处于几千 eV 之下, 属于低能电子; 并且亚细胞结构中的空间能量沉积分布对理解电离辐射直接损伤的基本机理尤为重要^[3]. 因而本文给出了低能电子径迹中亚细胞结构生物靶元内能量沉积频率的计算方法和结果.

2 能量沉积频率的计算

2.1 能量沉积频率算法

我们选取的计算介质为液态水, 这是因为生物体中活细胞的最主要成份是水, 大多数生物含有的水分约占鲜重的 80% — 90%. 细胞中水分以结合水和游离水两种状态存在,

* 中国科学院八·五重点课题.

而绝大部分是游离水, 它可作为细胞中代谢产物相互反应的溶剂, 因此可以肯定地说水不再是填充在细胞中结构分子空间的一种无活力的介质, 水与细胞内的亚细胞结构如 DNA 分子、染色质丝等形成了一种分不开的单元与体系, 它决定了细胞的结构与功能^[4]。也正是这样的原因, 我们取液态水等效 DNA 分子及染色质丝等与细胞的遗传功能有直接关系的生物靶介质, 并且这样的等效已被广泛应用^[3,5]。

这里提出的生物靶元即为 DNA 分子片段模型或染色质丝片段模型, 它们都是产生辐射效应的亚细胞结构。考虑到 DNA 分子片段和染色质丝片段的空问结构, 把它们分别模型化为直径为 2nm、高为 2nm 和直径为 25nm、高为 25nm 的圆柱体。因而能量沉积频率就是带电粒子径迹中生物靶元模型化产生的圆柱体内的沉积能量大于规定的能量阈值的几率, 而该规定的能量阈值与产生辐射效应的临界值有关。

电子的径迹由我们已建立的 Monte Carlo 模型^[5]模拟计算得到。在液态水中每一初始电子或次级电子都由其出发点一直跟踪直到其截止能量之下, 记录电子与水分子相互作用点的位置坐标及能量沉积, 从而电子的径迹就由这些量保存下来, 就具有相同出发点的电子径迹而言, 由于沿电子慢化路程上的随机相互作用而变得相差很大。

为了计算电子径迹中生物靶元内的能量沉积频率分布, 需将靶元随机地叠加到电子径迹中, 经过大量的统计抽样实验得到。其具体过程为: 用大量相同出发点的电子径迹在三维坐标轴上的最大横向距离建立一个虚拟的球体, 用该球体逐个把每一径迹包围起来, 球心与每一径迹的出发点重合, 随机地将生物靶元叠加到该球体内, 就可统计该靶元内能量沉积大于上面提到的阈值能量 E 的频率 $f(>E)$, 称之为单径迹效应。为了确保统计精度, 对每一径迹进行 10^4 次以上的抽样, 同时比较球体内的总能量沉积与它的体积的比值和所有靶元内的总能量沉积与它们体积总和的比值, 也可得到计算的精确度, 因为理论上两者是相等的。

2.2 低能电子径迹中能量沉积频率的计算结果

我们计算了初始能量为 1000eV、500eV、300eV 低能电子径迹中能量沉积频率分布,

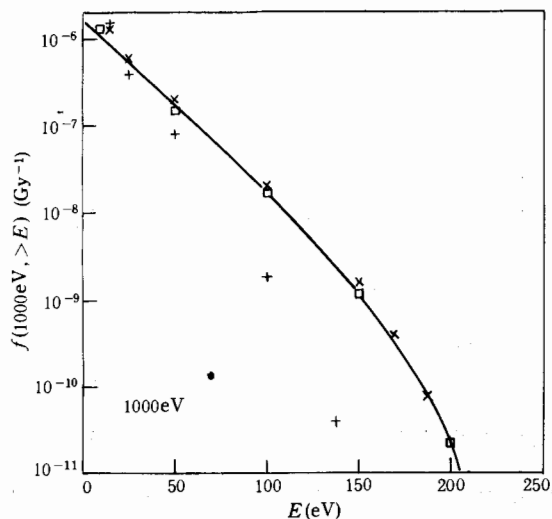


图1 计算的1000eV电子径迹中DNA分子片段内绝对能量沉积频率与OREC和CPA程序结果的比较

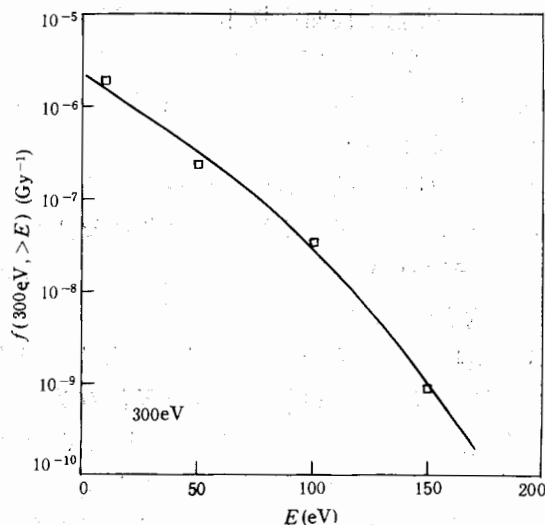


图2 300eV 电子径迹中 DNA 分子片段内的绝对能量沉积频率分布

计算的统计误差均在 3% 之内。图 1、图 2 分别是 1000eV 和 300eV 电子径迹中 DNA 分子片段模型内的绝对能量沉积频率；图 3 是 1000eV 电子径迹中染色质丝片段模型内的绝对能量沉积频率。这些绝对频率 $f(>E)$ 都是在液态水中受到剂量为 1Gy 电子照射时单电子径迹内能量沉积大于阈值 E 的计算结果。如图 1，对于 1000eV 电子，美国 Oak Ridge 国家实验室的 OREC 程序和德国的 CPA 程序结果同我们的结果比较发现，阈值能量 E 较低时，三者的差距较小；当 E 大于 50eV 时，OREC 和 CPA 结果的差距几乎超过了一个数量级，而我们的计算结果居二者之间，但与 CPA 结果更为接近。

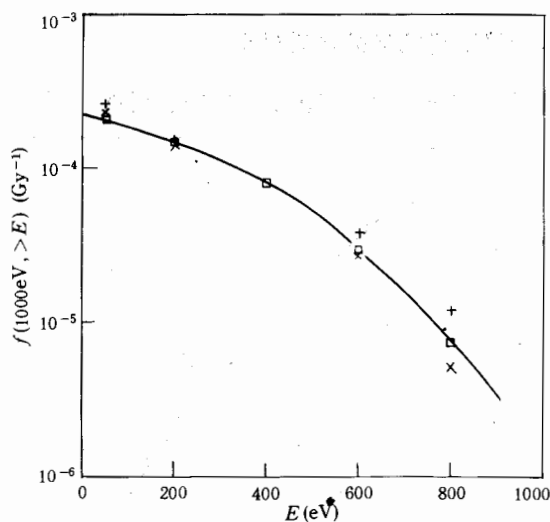


图3 1000eV 电子径迹中染色质丝片段内的绝对能量沉积频率分布

上面得到的绝对频率都仅是单径迹效应的结果，即计算时单独处理每一个径迹，这样就忽略了不同径迹的重叠，但文献 [3] 指出对于较小的靶元，除非受到非常大的剂量

照射, 径迹重叠效应是可以忽略的.

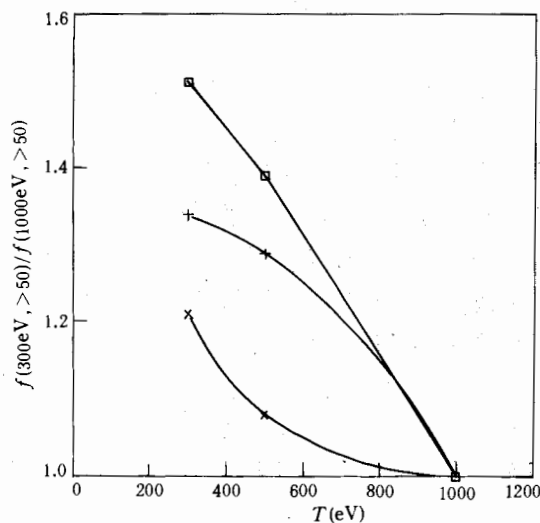


图 4 能量沉积阈值 $E=50\text{eV}$ 的相对能量沉积频率

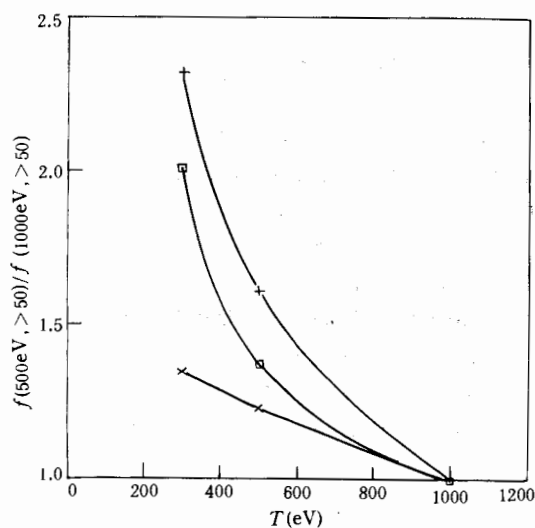


图 5 能量沉积阈值 $E=100\text{eV}$ 的相对能量沉积频率

图 1, 3, 4, 5 中的符号“□”、“×”和“+”分别是我们的计算结果、CPA 结果和 OREC 结果.

图 4、图 5 是相对能量沉积频率的结果, 它们分别对应于阈值能量 $E=50\text{eV}$ 和 $E=100\text{eV}$ 两种情况. 1000eV 电子径迹中 DNA 分子片段模型内的绝对能量沉积频率 $f(1000\text{eV}, >E)$ 作为参考量, 得到了 300eV 、 500eV 电子的绝对能量沉积频率 $f(300\text{eV}, >E)$ 和 $f(500\text{eV}, >E)$ 与参考量的比值, 此值为相对能量沉积频率. OREC 值、CPA 值和我们的计算值相差都较大, 但它们都给出同一规律, 即能量处于几百到几千 eV 之间时, 电子的能量越低, 阈值能量 E 为上面所给的值的绝对和相对能量沉积频率越大. 我们认为造成三者计算差距的原因是目前还缺乏统一的液态水中的电子作用截面.

3 讨论与结束语

由于能量沉积频率正比于生物效率,因而计算结果表明低能电子的生物效率比较高能量电子的大,这与实验结论^[6]相符合.

低能离子注入造成生物体深部效应已为许多研究者所发现,但仅靠低能离子本身有限射程的作用范围远未达到所观察到生物效应的深度,因而我们曾提出了低能离子注入的间接作用——软X射线机制^[7,8],认为低能离子是特征软X射线的激发源,而软X射线穿越很厚的深度,造成深部生物效应.但归根结蒂,软X射线作用于生物细胞是通过康普顿散射或光电效应产生的低能电子的作用,例如生物组织含量极高的C元素特征超软X射线与原子发生作用产生约280eV左右的低能电子,故这里的计算支持了软X射线机制.况且我们的计算就是针对单径迹效应,当软X射线穿越较厚的深度时,其强度已衰减得较弱,因而产生的低能电子对生物体的作用近乎是单径迹作用了,这一点更加确信了我们提出的作用机理.

对低能电子径迹结构的研究有助于我们阐明重离子生物效应的机理和建立相应的模型.

参 考 文 献

- [1] 王学栋等,安徽农业科学, 3 (1988) 37.
- [2] S. Schmidt, In: 3th Workshop on Heavy Charged Particles in Biology and Medicine, GSI, Darmstadt, July 13 — 15, 1987, P.A8.
- [3] H. Nijoo et al., *Phys. Med. Biol.*, **34** (1988) 691.
- [4] 郑国昌,细胞生物学(第二版),高等教育出版社,1992.
- [5] 李强等,重离子径迹结构的Monte Carlo 计算模型,核物理动态,待发表.
- [6] D. T. Goodhead et al., *Phys. Med. Biol.*, **28** (1983) 485.
- [7] Wei Zengquan et al., *Nucl., Instr. Methods*, **B578** (1995) 1.
- [8] 卫增泉等,安徽农业大学学报, **21** (1994) 246.

Frequency Distributions of Energy Deposition in Low Energy Electron Track

Li Qiang Wei Zengquan Ma Shouwu

(Institute of Modern Physics, The Chinese Academy of Science, Lanzhou 730000)

Received 3 December 1994

Abstract

Based on our Monte Carlo calculation model, frequency distributions of energy deposition in areas of DNA segment and chromatin fibre segment by a low energy electron are calculated in liquid water. The results are compared with those of OREC code and CPA code. These calculated results are theoretical evidence of soft X ray mechanism which was suggested by us in order to explain physical mechanism of deep biological effect produced by low energy heavy ion implantation.

Key words low energy electron, DNA segment, chromatin fibre segment, frequency of energy deposition.