

Geant4中不同物理列表对硼中子俘获治疗剂量分布的影响

陈昭,雷琴,杨鹏,文玉梅,何冬林,吴章文,勾成俊

辐射物理及技术教育部重点实验室/四川大学原子核科学技术研究所,四川 成都 610064

【摘要】 Geant4是基于C++编写的开源蒙特卡洛模拟软件,提供多种包含中子与物质相互作用的物理列表。本研究采用Geant4提供的几种物理列表,对沿中子束方向的总吸收剂量、硼剂量和非硼剂量深度分布进行计算,并与FLUKA进行比较,模拟中子能量从0.025 3 eV到10 MeV。对于整个模拟中子能段,结果显示添加 $S(\alpha, \beta)$ 热模型的高精度中子物理列表(Geant4_HP_T)在总吸收剂量、硼剂量和非硼剂量深度分布上均与FLUKA符合很好,初步验证了Geant4能应用于硼中子俘获治疗(BNCT)相关研究。对于低能中子(<1 MeV), $S(\alpha, \beta)$ 热模型对BNCT剂量深度分布的影响较大,QBBC和QGSP_BERT不适用于BNCT剂量分布计算。

【关键词】 硼中子俘获治疗;硼剂量;非硼剂量;剂量深度分布;Geant4;FLUKA

【中图分类号】 R811;R312

【文献标志码】 A

【文章编号】 1005-202X(2019)01-0001-05

Effects of different Geant4 physics lists on boron neutron capture therapy dose calculation

CHEN Zhao, LEI Qin, YANG Peng, WEN Yumei, HE Donglin, WU Zhangwen, GOU Chengjun

Key Laboratory for Radiation Physics and Technology of Ministry of Education/Institute of Nuclear Science and Technology, Sichuan University, Chengdu 610064, China

Abstract: Geant4 is an open source Monte Carlo simulation toolkit written in C++, and it provides a variety of physical lists including neutron interactions with matter. Herein several physical lists given by Geant4 are used to calculate the depth distributions of total absorption dose, boron dose and non-Boron dose along the direction of the neutron beam, and the obtained results were compared with FLUKA. The simulation neutron energy is from 0.025 3 eV to 10 MeV. In the studied energy range, the results show that the high-precision neutron physics list (Geant4_HP_T) with $S(\alpha, \beta)$ thermal model agrees well with FLUKA in the depth distributions of total absorbed dose, boron dose and non-boron dose, which preliminarily verifies that Geant4 can be used in the researches on boron neutron capture therapy (BNCT). For low energy neutrons (<1 MeV), the $S(\alpha, \beta)$ thermal model has remarkable effects on the depth distribution of BNCT dose, and both QBBC and QGSP_BERT aren't suitable for the calculation of BNCT dose distributions.

Keywords: boron neutron capture therapy; boron dose; non-boron dose; dose depth distribution; Geant4; FLUKA

前言

硼中子俘获治疗(Boron Neutron Capture Therapy, BNCT)是一种二元靶向放疗技术,由Locher^[1]于1936年首次提出。在肿瘤和正常组织中,BNCT辐射场会产生多种次级粒子,例如:质子、光子、 α 和 ${}^7\text{Li}$ 等粒子^[2],辐射产生的剂量来源主要分为硼剂量、 γ 剂量、中子剂量

和质子剂量^[3-4]。本文将BNCT辐射场剂量分成两部分:(1)硼剂量(Boron dose),仅由组织中的 ${}^{10}\text{B}$ 与中子相互作用产生高LET的 α 和 ${}^7\text{Li}$ 粒子在组织中的剂量沉积;(2)非硼剂量(non-Boron dose),即除由 ${}^{10}\text{B}$ 与中子作用产生的 α 和 ${}^7\text{Li}$ 粒子之外的剂量,主要包括组织中的 ${}^{14}\text{N}$ 发生 ${}^{14}\text{N}(n, p){}^{14}\text{C}$ 反应产生的0.54 MeV的质子和反冲核 ${}^{14}\text{C}$ 在组织中的剂量沉积,组织中的 ${}^1\text{H}$ 发生 ${}^1\text{H}(n, n')p$ 反应产生的反冲质子在组织中的剂量沉积,组织中的 ${}^1\text{H}$ 原子发生 ${}^1\text{H}(n, \gamma){}^2\text{H}$ 反应产生2.2 MeV的 γ 射线和伴随中子束的 γ 射线在组织中的沉积剂量。由于BNCT辐射场的复杂性,目前开发的BNCT治疗计划系统(Treatment Planning System, TPS)中的剂量计算基本采用蒙特卡洛(Monte Carlo, MC)程序进行模拟计算^[5-9]。

【收稿日期】2018-07-26

【基金项目】国家重点研发计划(2016YFC0105103)

【作者简介】陈昭,硕士研究生,主要研究方向:辐射物理与医学物理,
E-mail: 1479130624@qq.com

【通信作者】勾成俊,研究员,主要研究方向:辐射物理与医学物理, E-mail: GOUCJSCU720@scu.edu.cn

Geant4(Geometry and Tracking 4)是用于模拟粒子通过物质的MC软件工具包,由欧洲核子研究组织(CERN)开发,广泛应用于高能物理、天体物理、空间科学、医学物理和辐射防护等领域^[10]。Geant4优势是提供不同的物理列表并公开物理列表源代码,用户可以根据自己需求添加物理过程和修改物理过程^[11]。Geant4提供了多种包含中子与物质相互作用的物理列表。Tavakoli等^[11]比较不同物理列表计算70 MeV的高能中子在水模中的剂量沉积,QGSP_BIC_HP物理列表与FLUKA计算结果符合较好。Geng等^[12]对Geant4中不同物理列表在辐射防护中低能中子与人体等效组织相互作用的剂量计算进行研究,结论是使用高精度中子物理模型的物理列表计算结果和MCNP计算结果符合较好,采用S(α , β)热中子散射模型,能减小高精度中子物理列表与MCNP之间的差异。Rosane等^[13]使用Geant4不同物理列表对辐射防护中的周围剂量当量和周围吸收剂量进行计算,中子能量低于15 MeV时,使用高精度中子物理模型和S(α , β)模型的物理列表计算结果比仅使用高精度中子物理模型更好的符合已发表数据。同时,Rosane等^[13]在文中指出Geant4是否适合BNCT剂量计算,目前尚不明确。Ghal-Eh等^[14]研究结果验证了FLUKA可以用于BNCT剂量计算,作为经过很好验证和广泛使用的MCNP(X)之外的又一选择。本文采用Geant4中不同物理列表对BNCT剂量分布进行相关研究,并与FLUKA模拟结果进行比较。

1 材料与方法

1.1 模拟模型

模拟模型如图1所示,模体(Phantom)大小为(15×15×15) cm³,填充ICRU 46号报告^[15]中的等效组织材料,具体组织材料成分见表1,¹⁰B浓度为30 ppm,放置于空气中。中子束为单能单向源,沿模体中心轴入射。模拟中子束能量从0.025 3 eV到10 MeV。所有模拟计算追踪粒子数为10⁷个。记录区域如图1所示,沿中子束方向每隔5 mm记录总吸收剂量、硼剂量和非硼剂量深度分布,记录层大小为(20×20×5) mm³。所有计算结果对入射粒子归一化。

1.2 Geant4模拟

本文采用Geant4.10.3版本。BNCT使用的中子束集中在热中子和超热中子能量段,Geant4中带有低能中子与物质相互作用的物理列表有QGSP_BIC_HP、FTFP_BERT_HP、QGSP_BERT_HP、QBBC和QGSP_BERT等^[10],其中QGSP_BIC_HP、FTFP_BERT_HP和QGSP_BERT_HP高精度物理列

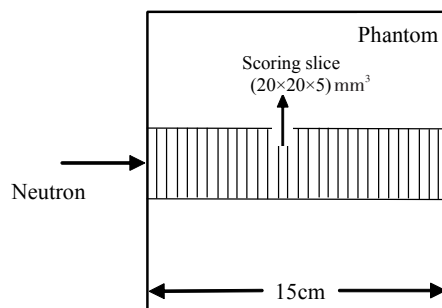


图1 模拟模型

Fig.1 Simulation model

表1 等效组织材料成分(密度: 1.0 g/cm³)

Tab.1 Composition of tissue equivalent material (density: 1.0 g/cm³)

Element	H	C	N	O
Percent/%	10.1	11.1	2.6	76.2

表采用相同的高精度中子物理模型处理0~20 MeV的中子与物质相互作用,本文记为Geant4_HP;中子能量低于4 eV时,Geant4.8.2之后的版本提供S(α , β)(动量转移 α ,能量转移 β)模型处理热中子与分子的弹性散射^[16]。Goorley等^[17]研究结果显示,MCNP采用S(α , β)热模型与自由气体模型计算BNCT热中子剂量率时,两种模型计算结果差异显著。本文采用Geant4自带的轻水S(α , β)散射律进行相关研究,添加S(α , β)的高精度中子物理列表记为“Geant4_HP_T”。不同物理列表采用的中子物理模型及其反应截面见表2和表3。

1.3 FLUKA模拟

FLUKA^[18]2011.2c用于本文研究,与Geant4模拟计算结果进行比较。根据FLUKA用户手册介绍^[19],DEFAULTS卡推荐选用PRECISION,使用USRBIN和AUXSCORE卡记录总吸收剂量、硼剂量和非硼剂量深度分布,使用USERWEIG卡和comscw.f用户程序将计算结果的单位转换成Gy。

2 结果与讨论

沿中子束方向的总吸收剂量(Total absorption dose)深度分布如图2所示。中子能量为10 MeV时,Geant4_HP、Geant4_HP_T、QBBC和QGSP_BERT计算的总吸收剂量深度分布均与FLUKA符合很好。中子能量低于10 MeV时,QBBC和QGSP_BERT模拟结果与高精度中子物理列表(Geant4_HP、Geant4_HP_T)和FLUKA差异显著。中子能量为0.025 3 eV时,非高精度物理列表(QBBC、QGSP_BERT)没有剂量结果。对于中子能量为0.025 3 eV~10 MeV,采用S(α , β)热模型

表2 Geant4中不同物理列表采用的中子相互作用模型(<20 MeV)
Tab.2 Neutron interaction model in different physics lists of Geant4 (<20 MeV)

Process	Physics list			
	Geant4_HP	Geant4_HP_T	QBBC	QGSP_BERT
Elastic	NeutronHPElastic	NeutronHPThermalScattering(0-4 eV) NeutronHPElastic(4 eV-20 MeV)	hElasticCHIPS	hElasticCHIPS
Inelastic	NeutronHPInelastic	NeutronHPInelastic	BinaryCascade	BertiniCascade
Capture	NeutronHPCapture	NeutronHPCapture	nRadCapture	nRadCapture
Fission	NeutronHPFission	NeutronHPFission	---	---

表3 中子模型及其截面

Tab.3 Neutron models and their cross sections

Model	Cross section
NeutronHPElastic	NeutronHPElasticXS
NeutronHPThermalScattering	NeutronHPThermalScatteringData
NeutronHPInelastic	NeutronHPInelasticXS
NeutronHPCapture	NeutronHPCaptureXS
NeutronHPFission	NeutronHPFissionXS
hElasticCHIPS	NeutronElasticXS
BinaryCascade	NeutronInelasticXS
BertiniCascade	NeutronInelasticXS
nRadCapture	NeutronRadCapture

的高精度中子物理列表(Geant4_HP_T)与FLUKA结果符合较好,平均差异在5.2%之内。中子能量高于1 MeV时,Geant4_HP、Geant4_HP_T和FLUKA 结算结果符合较好。中子能量低于1 MeV时,Geant4_HP与Geant4_HP_T和FLUKA 计算结果之间差异显著,平均差异均在23%和22%以上,中子能量为0.025 3 eV时,平均差异高于80%。

图3显示了沿中子束方向的硼剂量深度分布。QBBC和QGSP_BERT在模拟中子能量段未能获取硼剂量深度分布。对于0.025 3 eV~10 MeV的中子,Geant4_HP_T与FLUKA计算的硼剂量深度分布符合较好,平均差异在8.3%以内。Geant4_HP与Geant4_HP_T和FLUKA获取的硼剂量深度分布之间的差异较大,平均差异均高

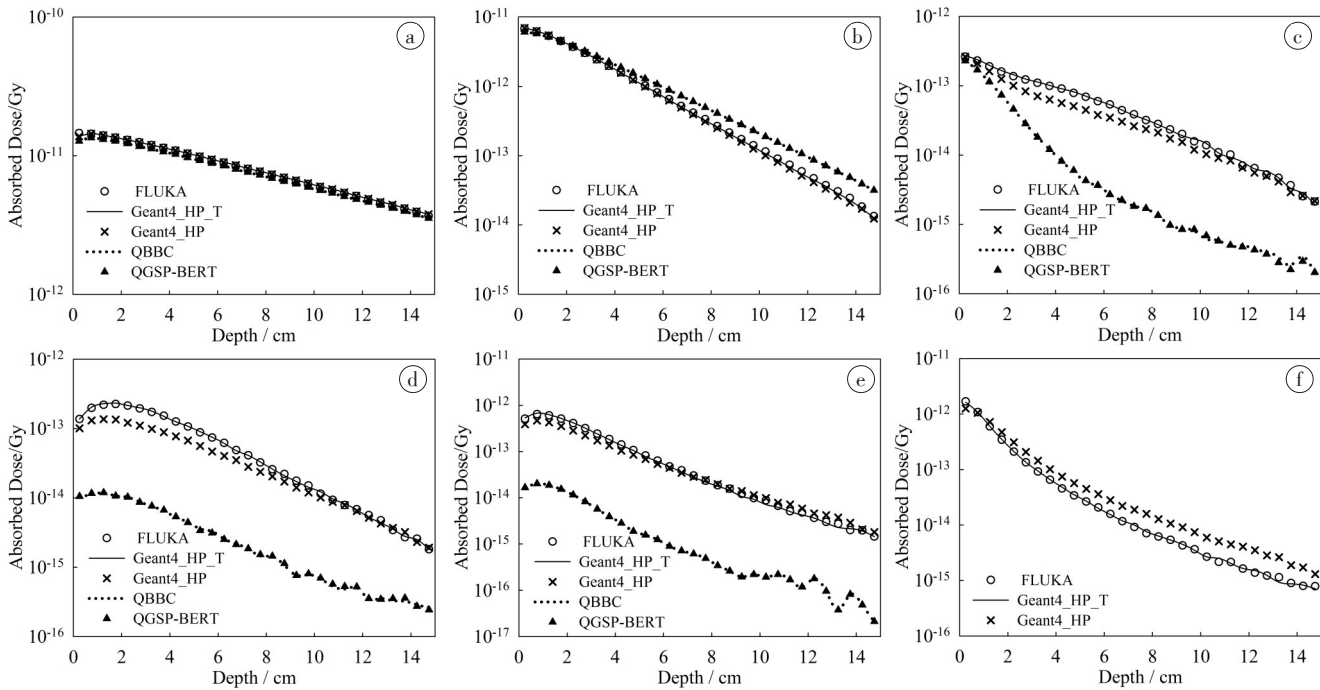


图2 总吸收剂量深度分布

Fig.2 Depth distribution of total absorption dose

a-f represent the incident neutrons of 10 MeV, 1 MeV, 10 keV, 100 eV, 1 eV, and 0.025 3 eV, respectively. The results are normalized to a primary neutron.

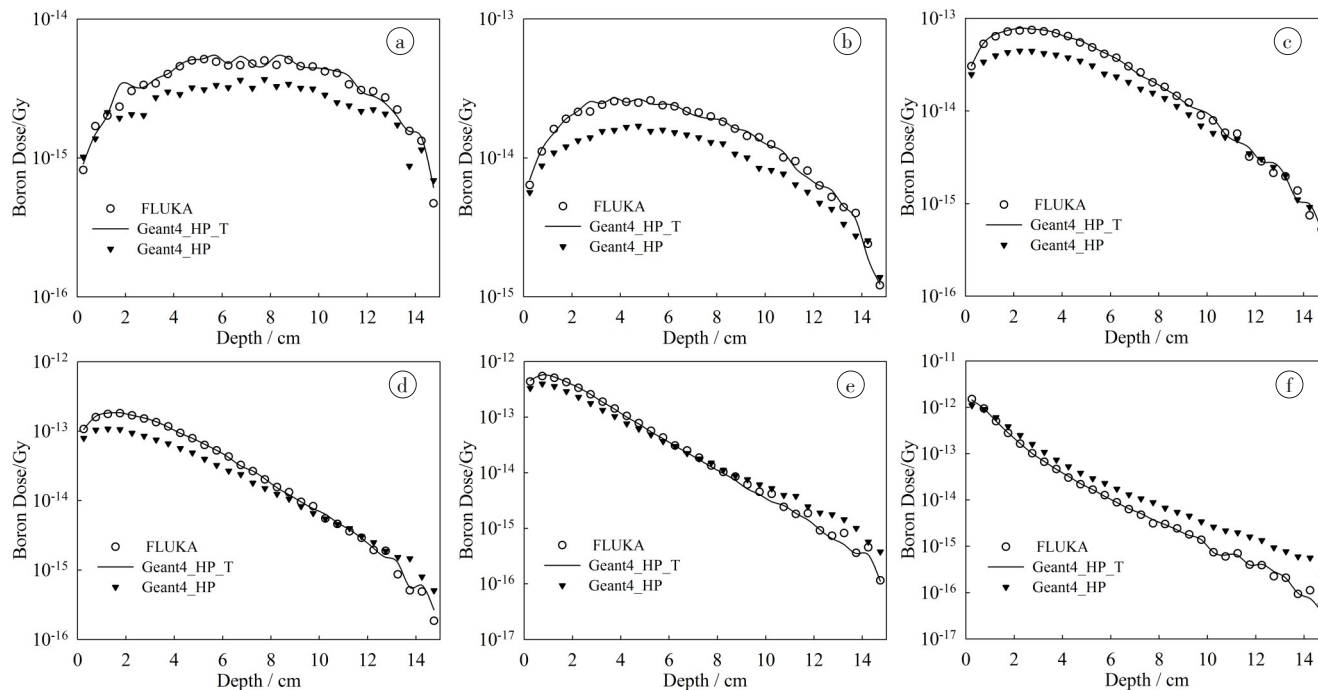


图3 硼剂量深度分布

Fig.3 Depth distribution of boron dose

a-f represent the incident neutrons of 10 MeV, 1 MeV, 10 keV, 100 eV, 1 eV, and 0.025 3 eV, respectively. The results are normalized to a primary neutron.

于27%和28%。

沿中子束方向的非硼剂量深度分布如图4所示,变化规律和总吸收剂量深度分布相似。中子能量低于10 MeV时,QBBC和QGSP_BERT模拟结果与高精度中子物理列表(Geant4_HP、Geant4_HP_T)和FLUKA差异很大。对于中子能量0.025 3 eV~10

MeV, Geant4_HP_T与FLUKA结果符合较好,平均差异在5.5%之内。中子能量高于1 MeV时,Geant4_HP、Geant4_HP_T和FLUKA结算结果符合较好。中子能量低于1 MeV时,Geant4_HP与Geant4_HP_T和FLUKA计算结果之间差异明显,平均差异均在15%和14%以上。

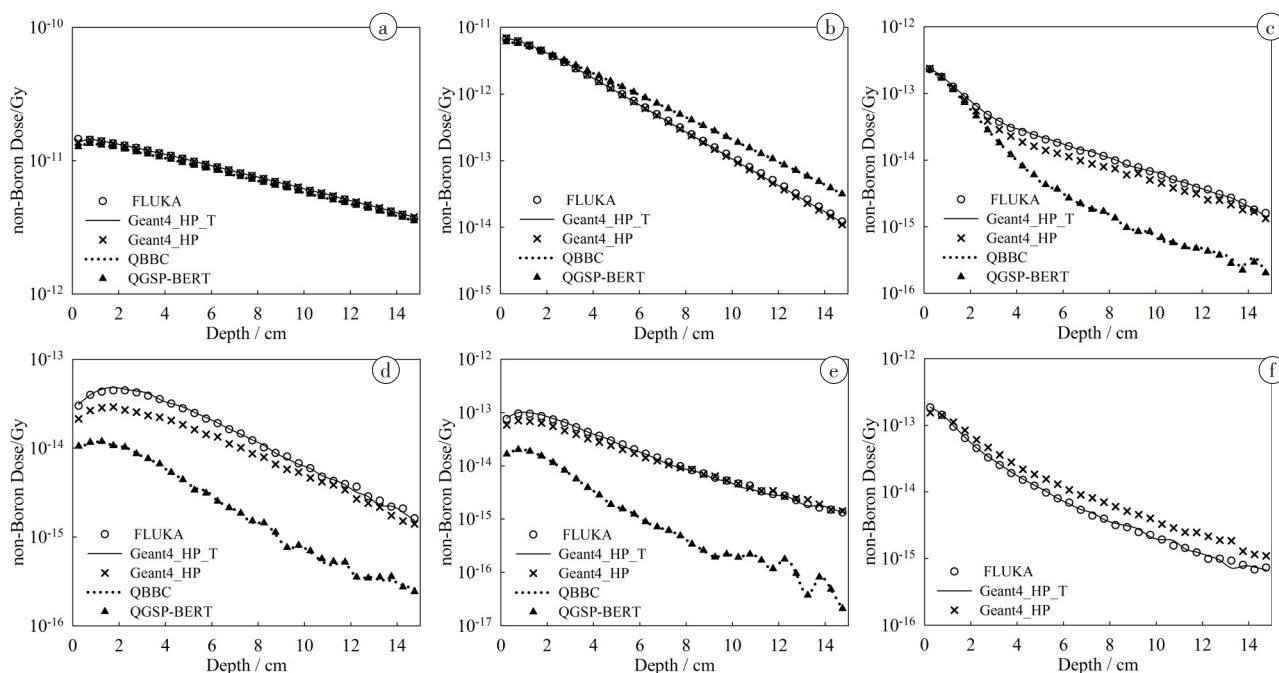


图4 非硼剂量深度分布

Fig.4 Depth distribution of non-boron dose

a-f represent the incident neutrons of 10 MeV, 1 MeV, 10 keV, 100 eV, 1 eV, and 0.025 3 eV, respectively. The results are normalized to a primary neutron.

根据上述结论, QBBC 和 QGSP_BERT 不能应用于热和超热中子的 BNCT 剂量分布研究。采用 $S(\alpha, \beta)$ 热模型的高精度中子物理列表 (Geant4_HP_T) 与 FLUKA 结果符合较好, 初步验证了 Geant4 适用于 BNCT 相关研究。

3 结论

本文研究了 Geant4 中不同物理列表对 BNCT 剂量分布的影响, 并与 FLUKA 进行比较, 模拟中子能量从 0.025 3 eV 到 10 MeV。对于 10 MeV 的中子, Geant4 中所有物理列表在总吸收剂量和硼剂量深度分布上均与 FLUKA 符合很好。对于低能中子 (<1 MeV), QBBC 和 QGSP_BERT 不能应用于 BNCT 剂量分布研究。对于 0.025 3 eV~10 MeV 的中子, 采用 $S(\alpha, \beta)$ 热模型的高精度中子物理列表 (Geant4_HP_T) 与 FLUKA 在总吸收剂量、硼剂量和非硼剂量深度分布上符合较好, 平均差异均低于 8.3%, 初步验证了 Geant4 适用于 BNCT 相关研究。在中子能量低于 1 MeV, 未采用 $S(\alpha, \beta)$ 热模型的高精度中子物理列表 (Geant4_HP) 与 Geant4_HP_T 和 FLUKA 在总吸收剂量、硼剂量和非硼剂量深度分布上差异较大, 即 $S(\alpha, \beta)$ 热模型对 BNCT 剂量分布的影响不可忽视。

【参考文献】

- [1] LOCHER G L. Biological effects and therapeutic possibilities of neutrons[J]. AJR Am J Roentgenol, 1936, 36: 1-13.
- [2] CODERRE J A, MAKAR M S, MICCA P L, et al. Derivations of relative biological effectiveness for the high-LET radiations produced during boron neutron capture irradiations of the 9L rat gliosarcoma *in vitro* and *in vivo*[J]. Int J Radiat Oncol Biol Phys, 1993, 27(5): 1121-1129.
- [3] 曹勤剑, 郑建国, 刘立业. 硼中子俘获治疗(BNCT)及剂量测量方法[J]. 中国辐射卫生, 2016, 25(2): 221-224.
CAO Q J, ZHENG J G, LIU L Y. The boron neutron capture therapy and the dose measuring methods[J]. Chinese Journal of Radiological Health, 2016, 25(2): 221-224.
- [4] PALMER M R, GOORLEY J T, KIGER W S, et al. Treatment planning and dosimetry for the Harvard-MIT phase I clinical trial of cranial neutron capture therapy[J]. Int J Radiat Oncol Biol Phys, 2002, 53(5): 1361-1379.
- [5] WOJNECKI C, GREEN S. A preliminary comparative study of two treatment planning systems developed for boron neutron capture therapy: MacNCTPlan and SERA[J]. Med Phys, 2002, 29(8): 1710-1715.
- [6] NIGG D W. Computational dosimetry and treatment planning considerations for neutron capture therapy[J]. J Neurooncol, 2003, 62(1-2): 75-86.
- [7] NIEVAART V A, DAQUINO G G, MOSS R L. Monte Carlo based treatment planning systems for boron neutron capture therapy in Petten, the Netherlands[J]. J Phys Conf Ser, 2007, 74: 021012.
- [8] KUMADA H, TAKADA K, SAKURAI Y, et al. Development of a multimodal Monte Carlo based treatment planning system[J]. Radiat Prot Dosimetry, 2018, 180(1-4): 286-290.
- [9] LIU Y W, CHANG C T, YEH L Y, et al. BNCT treatment planning for superficial and deep-seated tumors: experience from clinical trial of recurrent head and neck cancer at THOR[J]. Appl Radiat Isot, 2015, 106: 121-124.
- [10] AGOSTINELLI S, ALLISONAS J, AMAKOE K, et al. Geant4-a simulation toolkit[J]. Nucl Instrum Methods Phys Res A, 2003, 506(3): 250-303.
- [11] TAVAKOLI M B, MOHAMMADI M M, REIAZI R, et al. Evaluation on Geant4 hadronic models for pion minus, pion plus and neutron particles as major antiproton annihilation products[J]. J Med Signals Sens, 2015, 5(2): 105-109.
- [12] GENG C R, TANG X B, GUAN F D, et al. Geant4 calculations of neutron dose in radiation protection using a homogeneous phantom and a Chinese hybrid male phantom[J]. Radiat Prot Dosimetry, 2016, 168(4): 433-440.
- [13] ROSANE M R, DENISON S. Comparison of the neutron ambient dose equivalent and ambient absorbed dose calculations with different Geant4 physics lists[J]. Radiat Phys Chem, 2017, 139: 179-183.
- [14] GHAL-EH N, GOUDARZI H, RAHMANI F. FLUKA simulation studies on in-phantom dosimetric parameters of a LINAC-based BNCT[J]. Radiat Phys Chem, 2017, 141(C): 36-40.
- [15] ICRU 46. Photon, electron, proton and neutron interaction data for body tissues[R]. International Commission on Radiation Units and Measurements, 1992.
- [16] GARNY S, LEUTHOLD G, MARES V, et al. Geant4 transport calculations for neutrons and photons below 15 MeV[J]. IEEE Trans Nucl Sci, 2009, 56(4): 2392-2396.
- [17] GOORLEY J T, KIGER W S, ZAMENHOF R G. Reference dosimetry calculations for neutron capture therapy with comparison of analytical and voxel models[J]. Med Phys, 2002, 29(2): 145-156.
- [18] BALLARINI F, BATTISTONI G, CAMPANELLA M, et al. The FLUKA code: an overview[J]. J Phys Confer Series, 2006, 41: 151-160.
- [19] Fluka manuals[EB/OL]. [2018-01-06]. <http://www.fluka.org/content/manuals/FM.pdf>.

(编辑:薛泽玲)