原子衝突学会誌「しょうとつ」 2014 年第 11 巻第 3 号 Journal of atomic collision research, vol. 11, issue 3, 2014.

# 原子衝突学会誌

# しようとつ <sup>第11巻</sup> 第3号 2014年

**巻頭言** 会長挨拶 髙橋正彦 解説 重粒子線の動径線量 森林健悟



原子衝突学会賛助会員(五十音順)

アイオーピー・パブリッシング・リミテッド(IOP 英国物理学会出版局)

# Institute of Physics

http://journals.iop.org/

アステック株式会社



アドキャップバキュームテクノロジー株式会社



http://www.astechcorp.co.jp/

http://www.adcap-vacuum.com

有限会社イーオーアール



Electronics Optics Research Ltd.

http://www.eor.jp/

株式会社オプティマ

Optima Corp.

http://www.optimacorp.co.jp/

http://www.editage.jp http://www.cactus.co.jp

カクタス・コミュニケーションズ株式会社

ed/tage

Helping you get published キャンベラジャパン株式会社



クリムゾン インタラクティブ プライベート リミテッド



株式会社サイエンス ラボラトリーズ



http://www.canberra.com/jp/

http://www.enago.jp/ http://ulatus.jp/ http://www.voxtab.jp/

http://www.scilab.co.jp/

真空光学株式会社

空光学 社 -- Vacuum & Optical Instruments-

http://www.shinku-kogaku.co.jp/

http://www.spectra-physics.jp/



A Newport Corporation Brand ソーラボジャパン株式会社



ツジ電子株式会社



株式会社東京インスツルメンツ

http://www.thorlabs.jp/

http://www.tsujicon.jp/



http://www.tokyoinst.co.jp/

株式会社東和計測



http://www.touwakeisoku.co.jp/

株式会社トヤマ



株式会社ナバテック

真空機器の未来と歩む



http://www.navatec.co.jp/

http://www.toyama-jp.com/

仁木工芸株式会社





http://www.nikiglass.co.jp/

http://www.g5-hakuto.jp/

伯東株式会社



丸善株式会社



丸菱実業株式会社

# 丸菱実業株式会社

MARUBISHI CORPORATION

株式会社ラボラトリ・イクイップメント・コーポレーション



http://kw.maruzen.co.jp/

http://www.ec-marubishi.co.jp/

http://www.labo-eq.co.jp/

原子衝突学会誌

しょうとつ 第11巻第3号



# 目 次

<b>巻頭言</b> 会長挨拶	髙橋正彦	72
解説 重粒子線の動径線量	森林健悟	73
第21回原子衝突セミナー報告書	森下亨	92
第21回原子衝突セミナー参加報告	野村真史	93
第39回原子衝突学会年会のお知らせ	行事委員会委員長	94
第 54 回真空夏季大学のご案内	庶務委員会委員長	94
2014 年度 第1回運営委員会(文書持回)報告	庶務委員会委員長	95
2014 年度 第2回運営委員会(新旧合同)報告	庶務委員会委員長	95
第15回若手奨励賞選考結果のお知らせ	庶務委員会委員長	95
顕彰委員会からのお知らせ	顕彰委員会委員長	96
国際会議発表奨励事業に関するお知らせ	顕彰委員会委員長	96
広報渉外委員会 2014 年度活動計画	広報渉外委員会委員長	97
編集委員会からのお知らせ	編集委員会委員長	98
原子衝突学会ホームページ担当委員会の変更について	幹事(編集担当)	98
「しょうとつ」原稿募集	編集委員会事務局	98
ユーザー名とパスワード		99

## 巻 頭 言

# 会長挨拶

原子衝突学会会長 髙橋正彦 masahiko@tagen.tohoku.ac.jp

東日本大震災および引き続き起こった原子力 発電所事故から早三年が過ぎました. 今なお困 難な状況におかれている皆様に謹んでお見舞 い申し上げますと共に,日夜懸命に復旧・復興 に御尽力されているすべての方々に心から敬意 を表します.

さて、小職は、学会改称後の第一期に引き続 き会長を務めさせて頂くことになりました.これは、 第一期の幹事会、運営委員会および各委員会 委員の方々と力を合わせて取り組んだ、学会財 政の立て直しや社会への発信窓口たる学会 HP の一新など喫緊の課題に対する対応とその方向 性を会員の皆様が総体的にご支援下さったもの と理解しております.今後とも原子衝突研究の新 たな息吹と鼓動が感じられるように、会員の皆様 と共にさらなる高みを目指していきたいと思いま す.

第二期では、当学会ないしは原子衝突研究という学問領域の持続的発展を実現するための諸 課題に取り組んで参りたいと思いますので、会員の皆様のお力添えを何卒宜しくお願い申し上げます。「ゆく河の流れは絶えずして、しかももとの水にあらず」など先哲の幾多の名言に倣い、原 子衝突研究とは何であるのか、その学術的および社会的な機能と役割は何であるのかに関する 皆様お一人お一人の問題意識をあらためて集 合させることにより、学会の求心力と原子衝突研 究の対外的競争力を磨きあげ、本学問領域のさ らなる深化と広がりを会員の皆様と共に一歩ず つ体現していきたいと考えております.

そこで、上記のような問題意識における「不易」 と「流行」の葛藤をアウフヘーベンさせる場として、 学会の中心機能たる年会と会誌"しょうとつ"をよ り充実させていきたいと思います. 例えば, 年会 に関しては、2014年度はアジア原子分子物理学 国際セミナー(AISAMP)とのジョイント・シンポジ ウムの形で開催するなど他分野の研究者との交 流の場を積極的に設ける一方,原子衝突研究の 持続的発展のための最大の原動力が次代を担う 若手研究者や学生諸氏の健やかな成長と自覚 であることは論を俟ちませんので,登壇の機会の 増加や優秀ポスター賞を契機として老若男女の 垣根を越えた議論の活発化を図っていきたいと 考えております.他方では,原子衝突研究の"面 白さ"や"夢"の内容を社会にアピールするため、 市民公開講座などの新規広報活動にも取り組ん で参りたいと思います.

最後になりますが、学会活動に関する施策や その他、会員の皆様からの忌憚のないご意見や ご批判をお待ちしております、今後とも引き続き、 何卒宜しくお願い申し上げます.

2014年4月30日

## 重粒子線の動径線量

森林健悟 日本原子力研究開発機構 〒619-0215 木津川市梅美台 8 丁目 1-7 moribayashi.kengo@jaea.go.jp 平成 26 年 1 月 8 日原稿受付

動径線量はイオンと物質との相互作用を理解する上で重要な物理量であり、生命医科学の分野に広く 応用されている. 普及されている動径線量には、その動径に沿って付与する線量が大きく異なる二通り のモデルがある. これは、イオンと物質との相互作用の理論モデルが二通りあり、それらがそれぞれ異 なった線量分布を導き出したためである. 我々は、二通りの理論モデルの特徴を合わせ持つ動径線量 分布計算モデルを新たに開発し、入射イオンのエネルギー領域により、従来の二通りの動径線量分布 モデルのどちらかの傾向が現れるように自動的に振り分けることに成功した.

## 1. 序論

#### 1.1 背 景

イオンと固体や液体のような凝縮系の物質との 相互作用の理論では二通りの異なったモデル, すなわち,標的を自由電子ガスとしたモデル(本 解説では、「自由電子ガスモデル」と名付ける)と 原子(又は分子)の集まりとしたモデル(相互作 用を個々の原子や分子との衝突で近似するので 「二体衝突モデル」と名付ける)が存在する [1, 2]. この異なった性質を持った二通りの理論モデ ルが個別に発展してきたことにより、本解説で取 り扱う動径線量(radial dose) [又は局所線量 (local dose)] [3-6] では、大きく異なった二通り の分布モデルが導き出された(図1参照,詳細は 1.2節参照) [7-11]. ここで, 動径線量とは, 入射 イオンの軌道からの距離 (r) の関数として表し た線量(単位質量当りのエネルギー付与)のこと を言う. 我々は, 二体衝突モデルに自由電子ガ スモデルの特徴を取り入れたシミュレーションモ デルを開発した [12-16]. そして, 入射イオンの エネルギーにより自動的に動径線量がどちらか 一方の従来の動径線量分布モデルの傾向が現 れるように振り分けることに成功した.このモデル は、先に述べた問題を解決すること、およびイオ ンと物質の相互作用の物理現象のより深い解明 に繋がることを期待させる.

高速イオンが物質に入射すると物質中の原子 や分子の電離により、電離電子が発生し、この電 離電子が広い領域に渡って物質内にエネルギ ーを付与すると共に新たに電離電子を発生させ ることもある.ここで、電離電子とは、荷電粒子(イ オン又は電子)が物質中を通過するとき、その荷 電粒子による電離作用で跳ね飛ばされた電子の ことを言う.動径線量は、この電離電子の標的へ のエネルギー付与で決まり、イオンによる物質の ダメージの空間分布を知る上で重要な物理量で



図 1: 動径線量分布の一例.入射イオンは文献 [11] の Fig.1 と同じ(43 MeV/u の炭素イオン), --:二体衝突モデルを基に計算した動径線量分 布[7,8], --:自由電子ガスモデルを基に計算した 動径線量分布 [9,10].

Copyright© 2012 The Atomic Collision Society of Japan, All rights reserved.

あり,生命医科学の分野で広く応用されている.

### 1.2 生命医科学への応用

放射線生物学では,重粒子線の生物学的効 果比 [relative biological effectiveness (RBE)] [17, 18] が何故強いかよくわかっておらず, その 理由解明の研究が盛んに行われている.ここで, 生物学的効果比とは,放射線の生物に対する効 果の強さを表す指標である. Goodhead [19]と Ward [20]は、重粒子線照射によりクラスター DNA 損傷が生成し、それにより強い生物学的効 果比が生じるという仮説を提唱した.ここで, DNA 損傷とは、放射線などの外部刺激により DNAの部位(塩基, 糖, リン酸)の化学構造が変 化した状態を言い, クラスターDNA 損傷とは, 数 ナノメータの範囲に複数個の DNA 損傷が起きた 状態を言う. 人工的にクラスターDNA 損傷を生 成させた実験により、クラスターDNA 損傷が細胞 に変異や致死の起きる確率を増大させることは 見つかっている [21, 22]. しかしながら, 重粒子 線照射でどれくらいの量のクラスターDNA 損傷 がどのようにできるのかはわかっていない [21]. 一方, DNA 損傷の生成量と線量に相関関係が あり [11, 23], さらに, 動径線量は場所ごとの線 量を表す. すなわち, 動径線量分布は, クラスタ ーDNA 損傷生成過程の研究に不可欠な DNA 損傷の空間分布を示すことになり、この生成過程 の解明には,動径線量分布が有用であることが わかる. 動径線量が最も大きな値を持つ場所は 入射イオンの軌道からナノメートル辺りであるが (図1参照),現在のところナノメートルの分解能 で観測する手段がなく,実験は非常に困難で, シミュレーション研究が不可欠である.

一方,重粒子線癌治療が日本の放射線医学総合研究所やドイツの重イオン研究所(GSI)などで実施されているが,この治療計画に動径線量分布が使用されている [7-11].この治療計画では,生物学的効果比を非線形な現象と仮定し,近似式

$$L(D) = \alpha D + \beta D^2 \tag{1}$$

などで動径線量を考慮した関数を使用する [11]. ここで, D は線量を表し, L(D)は致死損傷量を表 し、αとβは定数である. すなわち, 動径線量を考 慮した致死損傷量から治療効果を予測している. しかしながら, 図 1 に一例を示すが, 使用を検討 されている動径線量は先に述べたように大きく異 なる二通りの分布が導出されている. 図 1 では文 献[11] の式(17)-(24)を用いて, 入射イオンが 43 MeV/u の炭素イオンの場合の分布関数を示 した. ここで, 赤線, 青線は, それぞれ, 二体衝 突モデル[7,8], 自由電子ガスモデルを基に作成 した動径線量分布 [9,10]である. 入射イオンの 軌道付近で付与線量が大きく異なることがわかる. 相違が大きいところは動径線量の値が大きく, 生 物学的効果比の大きさと関連しており, 重要であ るにもかかわらず, これらの分布が正しい物理現 象を記述しているかどうかはわかっていない.

#### 1.3 新規モデルの開発の経緯

Ziglerら[1]によれば、理論モデルが開発された 当初,二通りの理論モデルを共存させる以下の ような試みがあった. 'Bloch showed that the Bohr classical solution was valid for hard close collision while the Bethe solution was valid for weak scattering. Bloch then provided a solution which reduced to the Bethe solution for hard collisions and almost reduced to the Bohr solutions for weak scattering. The terms "hard" and "weak" refer to the amount of energy transferd and are not well defined. ここで, "Bohr solution", "Bethe solution" は、それぞれの理論モデルの考案者から名付け られており、それぞれ、自由電子ガスモデル、二 体衝突モデルの解を指す.しかしながら,時が経 つにつれ、この共存の試みはなくなり、正しく物 理現象を記述できるかわかっていないにもかか わらず, 文献 [11] のように二者択一, すなわち, どちらか一方のモデルのみを選択するようになっ てきた.

二通りの理論モデルでは、電子の運動に大き な違いが生じる.入射荷電粒子に対する電子の 応答を自由電子ガスモデルで記述できると仮定 すると、電子がある領域で振動運動する場合が あるのに対して、二体衝突モデルでは、電離電 子の振動運動はまったく起こらない.(電離)電 子の振動運動は、振動運動している領域内にお いて電子と標的分子との相互作用時間を長くする.この相互作用により,電子のエネルギーが標的に付与されるので,この振動運動は,単位体積当りのエネルギー付与である動径線量の増加に繋がると予測できる.

一方, 我々は(i) 重粒子線が水に照射されると その衝突電離により多くの水分子が電離し,(ii) 生成した水分子イオンが強い合成電場を作り出 し,(iii) その合成電場により多くの電離電子が 重粒子線の軌道付近に引き戻されることを見い 出した [12-14]. この引き戻し効果を, 自由電子 ガスモデルでのプラズマ振動励起の効果と同じ であると考えて, 新たに開発した我々の動径線 量計算モデルと従来のモデルとの関係性を考察 した. この新規モデルは, 二者択一とは異なる第 三の選択の提示が期待できる.

動径線量の r 依存性を考えると, r の値が大き な領域(数 nm 以上)では, 動径線量の値は小さ く、1/r<sup>2</sup>の割合で減少すること(1/r<sup>2</sup>の法則と呼ぶ) がわかっており、図1に示された二通りの分布で は、同じ傾向を示す. 一方, r が数 nm 程度の領 域では、二つの分布の間で相違が起こるので、 この領域の物理現象を明らかにするには、二通 りの理論モデルがどのように動径線量分布での 相違を生み出すかを解明することが鍵となる. そ こで, 我々は r が数 nm 程度の領域に焦点を絞 り,この領域での物理現象解明を目指した. 我々 は,前述のように,電離電子の引き戻し効果を取 り入れ、このrが数nm程度の領域で一部の電離 電子が入射イオンの軌道付近に長い時間,捕獲 されることを示し、このモデルを用いて動径線量 の計算を行い、この捕獲された電離電子の影響 を調べた.

動径線量シミュレーション研究が始まって半世 紀近くも経った今,新たにモデルの開発ができた 理由に関して私見を述べる.これは、コンピュー ターの発展のおかげである.このシミュレーション では、数万個の電離電子と分子との間の相互作 用を計算するのに多くの計算時間を費やす.さ らに、この相互作用を考慮して、電離電子の運 動を高精度に計算するのには、時間刻みを非常 に短くする必要があり、現在のスーパーコンピュ ーターでも数日程掛かる.ムーアの法則 [24] によれば、コンピューターの性能は3年以下で倍 になる.これを信用すれば、従来のモデルが開 発された 1970 年代から 30 年以上経ったので, 現在のコンピューターは、当時に比べて 210~ 1000 倍以上性能が良くなったことになる. すなわ ち、このシミュレーションを当時のコンピューター で実行すると多大な時間を費やしてしまい,研究 にならないと予測できる.また,新しい機構を解 明するためには、その機構が解明できるモデル を新たに開発する必要がある.我々は,X線自 由電子レーザーによる生体分子の損傷の評価に 使用したモデル [25-27] を重粒子線照射シミュ レーション用のモデルに改良した.このモデルは、 原子分子・プラズマ物理の研究用に開発したモ デルであるが、世界で数グループしかこのモデ ルを用いたシミュレーション研究は行われていな い. また, このような改良は, モデル及びコードの 中身を熟知している開発者しかできないと思える. 我々は、すべて独自のアイデアでモデルを開発 し、すべて手作りでコードを作成した [12-16, 26, 27].

#### 1.4 目的と構成

本解説の目的は, 重粒子線癌治療の治療計 画に使われている動径線量分布の問題点,その 問題解決に向けて開発した我々のモデルの特 徴,さらに,従来のモデルと我々の新規モデル で計算した動径線量分布の比較から得た知見を 読者に理解してもらうことである. 動径線量シミュ レーションでは、イオンや電離電子の多くの衝突 過程を用いているが,動径線量の物理や応用と 共に、どのような衝突過程がどのように使用され ているかなどに本学会の会員が興味をもってい ただけると期待する.2節で自由電子ガスモデル と二体衝突モデルを,3節で動径線量の従来の 計算手法を,4節で我々が開発した新規手法を 読者に理解してもらうためのデモと電子温度の時 間変化の結果と考察を解説する.5節では従来 の手法と新規手法で計算した動径線量分布を比 較検討し,6節のまとめで結び,7節で今後の展 開を紹介する.

#### 2. 理論モデル

イオンと固体や液体のような凝縮系の標的の相 互作用の理論では、複雑な標的の状態をどのよ うにモデル化するかが鍵となる.1 節の序論で述 べたように異なる理論モデルが二通りあるが、こ のことが動径線量に大きな相違がある二通りの 分布を生み出している(図1 参照).ここでは、詳 細は文献 [1,2] に譲り、相違点がわかるように 二通りの理論モデルの特徴を解説する.

#### 2.1 自由電子ガスモデル [2,28]

電子ガスとは、一様な正電荷が分布した空間 の中において、全電荷を中性に保つように存在 する電子の集まりのことを言う [1, 2]. このとき、 電子ガスの全エネルギーの物理量を表すハミル トニアン(H)は電子の位置( $\vec{r}_i$ )、運動量( $\vec{p}_i$ )の 関数として

$$H = \frac{1}{2m_e} \sum_{i=1}^{N} p_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1, j \neq i}^{N} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - U_0$$
(2)

と書ける. ここで, me, N, e, Uo はそれぞれ, 電子 の質量,電子の総数,素電荷,一様な正電荷と 電子との相互作用を表す.この式の右辺の第一 項, 第二項はそれぞれ, 電子の運動エネルギー, 電子間のクーロン相互作用を表す. 第二項を考 慮しないとき、自由電子ガスと呼ぶ. 高速イオン が自由電子ガス中を運動するとき、このイオンと 電子との相互作用により電子の分布が変化し、こ の変化により電荷の中性の状態が破れ,電場が 生じる.このとき、この電場が引き戻す力、すなわ ち, 復元力として電子に働く [2]. この復元力に より電子の集団運動による振動, すなわち, プラ ズマ振動が発生する、このモデルでは、電子は、 二種類の波動, すなわち, プラズマ振動波と単 独電子波となり、この二種類の波動は等しいエネ ルギーを持ち運ぶとする [28].

#### 2.2 二体衝突モデル

二体衝突モデルでは、標的を原子や分子の集まりとし、イオンと物質との相互作用をイオンと原子や分子との二体間の衝突過程で近似する.このモデルでは、自由電子ガスモデルと異なり、電子(電離電子)の振動運動は現れない.このモデ

ルが提唱された当初は、原子の束縛ポテンシャ ルをトーマス-フェルミモデルで近似し、この中に 電子が束縛されている標的を考え、衝突過程は、 ボルン近似で解かれた.このため、イオンのエネ ルギーが高い領域のみ二体衝突モデルが適用 され、エネルギーが低い領域では、自由電子ガ スモデルが適用された [1, 2].コンピューターを 用いて正確な原子や分子の状態が計算できるよ うになると、実際の原子や分子の束縛ポテンシャ ルが使用できるようになり、正確な阻止能の計算 が行われた [1].さらに、イオンや電子(電離電 子)と原子分子の衝突過程の実験や計算の高精 度なデータが蓄積され、低エネルギー領域でも 二体衝突モデルで正確な阻止能の計算が行わ れるようになった [3, 29, 30].

#### 3. 従来の動径線量計算モデル

最近では,二体衝突モデルを利用する研究が 増加しているように思える.これは、二体衝突モ デルが大規模シミュレーションに適していること、 阻止能を自由電子ガスモデルよりも高精度に計 算できるようになったこと [1] が原因と考えられ る. 阻止能が精度良く計算できることから, 入射 イオンから標的への最初のエネルギー付与は, 二体衝突の近似が良いと考えられる.しかしなが ら, 電離電子の運動は, 必ずしも二体衝突モデ ルで正しく記述できているとは言い切れず,図1 で示したように電子の運動で決まる動径線量分 布では用いる理論モデルによって異なった特性 が生じるが、これらの特性が正しく物理現象を記 述できているかどうかの結論はでていない [11]. ここでは、この二通りの理論モデルに基づいた動 径線量分布の計算手法を解説する.

二体衝突モデルを用いた動径線量分布の計 算には、主に、二つのモデルが開発された. 一 つはモンテカルロ法を用いたシミュレーション(本 記事では「Convetional Monte Carlo (CMC)モデ ル」と呼ぶ.)であり、もう一つはトラック構造計算 [Track structure calculations(TSC)] モデルであ る [3]. CMC モデルでは、(i)入射イオン衝突電 離過程で生成した電離電子のエネルギーと放出 角度に対する二重微分断面積、(iii)電離電子の衝



図2: CMCモデル(左図)と我々が開発した新規 モデル(右図)での重粒子線衝突電離で発生し たエネルギーの低い電離電子の運動のイメー ジ図.

突励起・電離断面積の三種類のデータが必要と なる. (i)のデータから電離電子の生成数, 初期 エネルギー, 放出角度を決める. (ii)のデータか ら電離電子の運動方向を計算する.(iii)のデー タから電離電子のエネルギーの減少量, すなわ ち, エネルギー付与量の計算を行い, エネルギ ー付与した場所とそのエネルギー値を記録し, 動径線量の評価に使用する.一方, Katz ら [4] は、動径線量分布の簡便なモデルであるTSCモ デルを開発した.この計算法では、入射イオンの 軌道を中心とした円筒を考え, 電離電子はその 円筒から垂直方向に放出され, 電離電子の飛程 とエネルギーの関係を線形であると仮定する.こ れは、 電離電子のエネルギーの減少量をエネル ギーには関係なく、一定と仮定することに相当す る. この TSC モデルにより, 1/r<sup>2</sup>法則 [3,4] が導 出された. この法則は, CMC モデル及びガスを 用いた実験 [31] でも再現でき, r が大きな場所 で正しいと判断され,広く使用されている.TSC モデルでは、入射イオンの軌道付近(円筒内)に は CMC モデルの計算値の r に対する平均値が 使用される [4]. 図 1 の赤線は TSC モデルによ る計算結果である.

Chatterjee ら [5, 6] は自由電子ガスモデルで 生じるプラズマ振動を考慮した動径線量分布を 導出する式を導出した(Chatterjee モデルと呼 ぶ).図1の青線は、このモデルによる計算結果 である.一方、電子の単独運動は、入射イオンの 軌道から遠ざかるのみとした.この振動運動は、



図 3: 重粒子線衝突電離で発生した分子イオン ()が作るポテンシャルと電離電子の動径方向 の運動のイメージ図. 重粒子線は,紙面に垂直に ポテンシャルが最も低い位置を横切る. -:エネ ルギーの低い電離電子, -:エネルギーの高い 電離電子.

入射イオンの軌道付近の領域で起こるとして、そ の領域を「コア」、それよりも遠方の領域を「ペナ ンブラ」と名付けた.2.1節で説明したエネルギー の分配から入射イオンが自由電子ガスに移行し たエネルギーの半分は、振動運動の電子に、残 りの半分は、単独運動の電子に与えた.さらに、 コア領域では、動径線量は、主として遅い電子に よるプラズマ振動と電子衝突励起に起因し、一 方、ペナンブラ領域では、主として速い電子によ る衝突電離過程に起因するとした.ただし、ペナ ンブラ領域は、前述の1/r<sup>2</sup>の法則に従うとした.

Chatterjee モデルでは,標的が水の場合,コア, ペナンブラ領域の半径  $r_c$ ,  $r_p$ は, それぞれ,

 $r_c = \beta c / \Omega_c = 0.0116 \ \beta \ (\mu m) \tag{3}$ 

$$r_p = 0.678E_{ion} - 1.925E_{ion} {}^{0.5} + 1.257 \,(\mu m)$$
(4)

で与えられる. ここで, *c*,  $\Omega_c$  はそれぞれ, 光速, プラズマ振動を表し,  $\beta = v_{ion}/c$  で定義され,  $v_{ion}$ は, 入射イオンの速度を表し,  $E_{ion}$  は, MeV/u の 単位のイオンエネルギーを表す. 式(4)は, イオ ンが標的水分子に一回衝突するときのエネルギ ー付与の最大値(これから電子の最大エネルギ ーが求まる) $E_{loss}^{max} = 2 m_e v_{ion}^2/(1-\beta^2)$  [32] から 求まる. このとき, コア, ペナンブラ領域の動径線 量  $D_c$ ,  $D_p$  は, それぞれ,

$$D_{c} = \frac{E_{ted}}{2\pi r_{c}^{2}} + \frac{E_{ted}}{4\pi r_{c}^{2} \ln(\sqrt{2.718}\frac{r_{c}}{r_{p}})},$$
(5)

$$D_{p} = \frac{E_{ted}}{4\pi r^{2} \ln(\sqrt{2.718} \frac{r_{c}}{r_{p}})}$$
(6)

で与えられる.ここで, *E*<sub>ted</sub> は,入射イオンが標的 中を単位長さ進んだときに付与した全エネルギ ーを表す.これらの式は,重粒子線癌治療の治 療計画に使用される動径線量分布にも利用が検 討されている(図1の青線参照) [9-11].

動径線量を重粒子線癌治療の治療計画に利 用することを最初に提案したKraftらは、文献 [3] の中で、動径線量分布の計算手法を解説した. 彼らは Chatterjee モデルを'The Core Penumbra model dose not reflect the physical reality: More than 80% of the total energy is used to liberate electrons from the target atom and to emit these delectrons with high energies. Less than 10% is left over excitation. Therefore, an equipartition of the energy between core and penumbra dose not hold.' と批評した.彼らは、図1の赤線の方の分布関数 を提案したが、この線においてコア領域での動 径線量の値が小さいのは、彼らが Chatterjee モ デルを信じなかったためと考えられる.しかしな がら、この批評には、Chatterjee モデルの重要な 要因であるプラズマ振動、すなわち、入射イオン と物質との相互作用により、電荷の中性の状態 の破れから電場が生じ、その電場によって引き 戻された電子の動径線量への影響に触れてい ない.それ故に、入射イオン軌道近傍で電荷の 中性状態が破れたときに個々の電離電子が受け る引き戻す効果まで考慮すると動径線量分布が どのようになるか調べる必要がある.そのために、 我々は 1.3 節で述べた新しいモデルを開発した (詳細は、次節参照).

#### 4. 新規モデル [12-16]

ここでは, 我々が開発したシミュレーションモデルの解説を行う. 図 1 で示したように, 重粒子線 癌治療の治療計画では, 二通りの動径線量分布 が検討されているが, 入射イオンの近傍のみに 相違が見られるので, 我々のモデル開発は, こ



図 4: 新規シミュレーションモデルのアルゴリズム

の領域が良く記述できるモデルの開発に焦点を 絞った [12, 13, 15]. 3 節で述べたように, 二体衝 突モデルが入射イオンから標的への最初のエネ ルギー付与を正しく記述できると考えられるので、 二体衝突モデルを基盤として,入射イオンの衝 突電離で生成したイオンからのクーロン力による 電子の引き戻し効果を導入した手法を開発した. 1.3 節で述べたように、この効果を自由電子ガス モデルでのプラズマ振動による動径線量への効 果と同等であると考えることにする.この新規モ デルと3節で示した CMC モデルとの主な相違を 図 2 に示す.相違は電離電子の運動にある. CMC モデルでは、電離電子は入射イオンの軌 道から離れる一方であったが,新規モデルでは, 入射イオンの衝突で生成した分子イオンの電場 が電離電子を軌道付近に引き戻す力として働き, これらの電離電子が軌道付近に捕獲され,長い 時間,標的分子と相互作用することを考慮した. このとき生成した分子イオンの電荷が作り出すポ テンシャルと、初期運動エネルギーが低い場合 (緑色の線)と高い場合(オレンジ色の線)の2種 類の電離電子の運動のイメージを図 3 に示す. 運動エネルギーが高い場合,このポテシャルか ら脱出して無限遠まで行くことができるが,運動 エネルギーが低いとき,このポテンシャル内にトラ ップされることがイメージできる(このポテンシャル の詳細は, 4.2.2節のデモを参照).

#### 4.1 アルゴリズム

具体的な手法のアルゴリズムを図 4 に示すが, この図の中で使用した手順は以下の通りである. (i)標的を水とし,標的内に液体密度(1 g/cc)に なるように水分子の位置を決める.時間(t)及び 電離電子の数( $N_e$ )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,水分子イオンと電離電子を生成さ せ, $N_e = N_e + 1$ とし,(v)電離電子の初期エネル 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,電離電子の初期エ 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 た電離電子のエネルギーを減らす. (ix) 入射イ オンと電離電子を $\Delta t$  後の場所へ移動させる. そ の際, 電離電子の速度は, 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.

次に,各手順の説明を行う.同時に,考慮しな かった関連過程とその理由,各手法の動作確認 の方法も解説する.

#### 4.1.1 **手**順(i)

標的は,直方体(底:一辺 10 nm の正方形,高 さ 30 nm)とし, 液体密度になるように, 水分子の 位置をランダムに標的内設定する.ただし,分子 間距離が2.8Å以上になるようにする、次に、Zhu らの計算値 [33] に基づき,水分子中の酸素原 子と水素原子の分極を点電荷として,酸素原子 と水素原子にそれぞれ,  $\delta^- = -0.65$ ,  $\delta^+ = 0.325$ となる分極を与える. H-O-H の角度と O-H の長 さをそれぞれ, 105°と 0.0975 nm とし, 標的中で は、O-Hの方向をランダムに決める.外部の電場 により、O-H の方向は電場を打ち消す方向に揃 う(誘電緩和と呼ぶ)ようになるが, THz 波を用い た実験 [34] から方向が揃うのには、数ピコ秒以 上必要であることがわかっており,動径線量計算 には, 100 fs までで十分であると判断した(4.3 節 及び 5 節参照)ので, O-H の方向の変化, すな わち、分子の回転運動は取り扱わない.

#### 4.1.2 手順(ii)

一つの入射イオンを標的の底面の中心から面 に垂直に入射させる.入射イオンとして 3 – 100 MeV/uのC<sup>6+</sup>イオンを取り扱う.取り扱った標的の 大きさは非常に小さいので,入射イオンエネルギ ー,速度は変化しないとする.

#### 4.1.3 手順(iii), (vi)

以下の衝突過程を取り扱う.(1)入射イオンと水 分子の衝突電離(A<sup>z+</sup>+H<sub>2</sub>O→A<sup>z+</sup>+H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>+e<sup>-</sup>), (2)電離電子と基底状態の水分子との衝突電離 ( $e^{-} + H_2O \rightarrow e^{-} + H_2O^{+} + e^{-}$ )及び,電子励起・振 動励起( $e^{-} + H_2O \rightarrow e^{-} + H_2O^{*}$ )過程,(3)電離電 子と電子励起状態の水分子との衝突電離過程. ここで, $H_2O$ , $H_2O^{*}$ はそれぞれ,基底,励起状 態の水分子を表す.過程(1)と(2)は既存の実験 データ [35–38]を用いるが,過程(3)はデータ が見つからなかったので,電子衝突電離断面積 の経験式 Lotz の公式 [39] に基づき,近似式

$$\sigma_{ie}(E_e) \propto \sigma_{ig}(E'_e) \frac{B_{ig}E_e \ln(E'_e / B_{ie})}{B_{ie}E'_e \ln(E_e / B_{ig})}$$
(7)

を用いる [12]. ここで, *E*<sub>e</sub>, *E*<sub>e</sub>'は, 電離電子のエ ネルギーを, *σ*<sub>ig(ie)</sub>, *B*<sub>ig(ie)</sub>,は, それぞれ基底(励 起)状態からの電子衝突電離断面積と電離に必 要なエネルギーを表す. ただし, 阻止能計算で は重要な要因である内殻電離過程は,以下の理 由から考慮しない. (a)この過程が起こる確率は, 非常に小さく,ここで取り扱う標的の大きさ(4.1.1 節参照)では,一回起きるか起きないか程度の頻 度であり,影響は小さく, 無視できると考えた. (b) この生成過程及びオージェ過程で発生する電離 電子のエネルギーは, 非常に高く,入射イオンの 軌道から十分に離れた領域(ペナンブラ領域)の 動径線量にのみ影響する(3節の Chatterjee モデ ルの説明参照).一方,ここでは,入射イオンの 軌道近傍(コア領域)に焦点を絞る.

衝突過程に関しては個々の分子,電離電子を 取り扱うので,分子動力学(MD)で使用されてい る方法 [25] と同じ方法を用いる.各標的分子の 中心に粒子(入射イオン,または電離電子)の運 動方向と垂直になるように断面積を設定し,一つ の粒子が断面積を通過したときのみ過程が起き るとする [12, 26, 27].断面積は複数の過程の和 である全断面積を取り扱い,過程が起きたと判断 した後,各断面積の大きさを統計的重率として取 り扱い,モンテカルロ法で(乱数を使って)起きた 過程を決める [12].このモデルに基づいて作成 したシミュレーションコードの動作確認は,イオン 衝突電離で生成した分子イオンの間隔と平均自 由行程 [式(14)参照]との比較から行った(詳細 は 4.2.1 節参照).

次に,その他の衝突過程に関する取り扱い(考 慮しなかった理由)の説明を行う.電荷移行と電 子損失過程は、入射イオンの電荷数を変化させる. 電荷数が変化すれば衝突電離断面積が変わるので、これらの過程は重要である. しかしながら、以下の理由から、これらの過程は取り扱わない. C<sup>6+</sup>イオンと C<sup>5+</sup>イオンの 2 つのイオンが共存している場合、C<sup>6+</sup>イオンの存在確率は、

$$P_e \sim \frac{\sigma_{el}}{\sigma_{ct} + \sigma_{el}} \tag{8}$$

で決まる [12, 29, 30]. ここで, *o*<sub>cl</sub>, *o*<sub>el</sub> は, それ ぞれ, 電荷移行過程 (C<sup>6+</sup> + H<sub>2</sub>O → C<sup>5+</sup> + H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>) と電子損失過程 (C<sup>5+</sup> + H<sub>2</sub>O → C<sup>6+</sup> + H<sub>2</sub>O + e<sup>-</sup>) の断面積である.入射イオンのエネルギーが十 分に大きいとき,  $\sigma_{ct}$ は Z<sup>3</sup>の割合で増加し,  $\sigma_{el}$ は Z<sup>-2</sup>の割合で減少するスケーリングが近似的に使 用できる [12]. ここで, Z は入射イオンの電荷数 を表す.3 MeV/uのエネルギーの C<sup>6+</sup>イオンでの これらの断面積の実験値及び計算値は知る限り 存在しないが,このスケーリングを用いて,He<sup>2+</sup>, He<sup>+</sup>イオンの断面積 [30] からそれぞれ,  $\sigma_{ct} \sim 5$ ×10<sup>-19</sup> cm<sup>2</sup>,  $\sigma_{el}$  ~ 2×10<sup>-18</sup> cm<sup>2</sup> と見積もれた [12]. このとき、C<sup>6+</sup>イオンの存在確率は80%になる.ま た,3 MeV/u のエネルギーの C<sup>5+</sup>イオンの衝突 電離断面積は約10<sup>-15</sup> cm<sup>2</sup> と見積もれて, その平 均自由行程は, 0.33 nm となり, これは水中での 水分子の核間距離とほぼ同じで C<sup>6+</sup>イオンの場 合とほぼ同じ効果が期待できる.将来,さらに低 いイオンエネルギーを取り扱えるように、モデル の拡張を予定しているが,その際,この二つの過 程は重要となる.このときには,新しい理論計算 や実験が必要となる.

イオンと電子間の再結合過程は Fujimoto の計 算値 [40] から数 100 fs の時間スケールと予測 でき、4.3 節、5 節の考察から動径線量シミュレー ションには  $t_{max}$  は 100 fs で十分と判断できたの で考慮しない. 捕獲解離過程 (e<sup>-</sup> + H<sub>2</sub>O → H<sub>2</sub>O<sup>-\*</sup> → OH + H<sup>-</sup>)の断面積は低エネルギーの電子に 対して 10<sup>-18</sup> cm<sup>2</sup> 以下になり[41], そのレート ( $R_{eda}$ )

$$R_{eda} = N_e \ \sigma_{eda} \ v_e \tag{9}$$

は 5 × 10<sup>12</sup> 1/s 以下, すなわち, 200 fs 以上の時

間で起きると見積もることができ、ここでは取り扱わない.ここで、 $N_e$ 、 $v_e$ は、それぞれ、電子の数密度、電子の速さを表す.

電離電子の弾性散乱に関しては,水分子の分極,水分子イオン,他の電離電子との相互作用 を考慮してニュートン方程式を解く(4.1.6節参 照).ただし,弾性散乱による電離電子のエネル ギーの減少は考慮しない(4.1.5節参照).

4.1.4 手順(iv), (v), (vii)

入射イオン・水分子間の衝突電離で生じる電 離電子の初期運動エネルギー(*E<sub>ei</sub>*)は,発生す る電離電子の初期エネルギーの分布関数 [*f*(*E<sub>ei</sub>*)] と乱数(*R<sub>n</sub>*)を用いた方程式

$$\frac{\int_{0}^{E_{ei}} f(E_{ei}') dE_{ei}'}{\int_{0}^{\infty} f(E_{ei}') dE_{ei}'} = R_n$$
(10)

から決める. 本研究では, f(Eei)は、様々なイオン 種,イオンエネルギーに対して実験値と良い一 致を示す Rudd のモデル [35,42] を用いて作成 した.水分子イオンなどの合成電場を考慮すると, シミュレーションでの Eei の値は実験値と異なるこ とに注意すべきである.この異なる理由を説明す る. 分子から電離電子が放出されるやいなや、そ の電離電子は、親分子からクーロン力を受ける. 実験では、このクーロン力が影響しなくなったとき、 電離電子のエネルギーを測定するので, Eei.sim = *E*<sub>ei</sub>, *exp* + *B* となる [14]. ここで, *B* は分子内での 電子の束縛エネルギー, Eei,sim(exp) はシミュレー ション(実験)での Eei の値を表す. ただし, 電場 を考慮しない場合では  $E_{ei} = E_{ei,exp}$ となる. ほとん どの電離電子の Eei,exp の値は 20 eV 以下 [35]で あるが,この電離電子のエネルギー領域では, 等方的放出角度分布が観測されている [43]. そ れゆえに、放出角度分布は、等方的に取り扱う. 電子衝突電離で生成した電離電子の初期エネ ルギーは、知る限り Nakazaki ら [44]の計算によ る平均値しか存在しないので,この平均値を使 用し, 放出角度分布は等方的に放出されるとす る.

これらの電離電子の放出される位置座標 $r_{ie}$ は

極座標系において,  $B = e / r_{ie0}$ の関係で決まる  $r_{ie0}$ を用いて

 $\vec{r}_{ie} = (x_{pi} + r_{ie0}\sin\theta\cos\phi,$ 

 $y_{pi} + r_{ie0}\sin\theta\sin\phi, z_{pi} + r_{ie0}\cos\theta)$ (11)

で与える. ここで, *x<sub>pi</sub>* (*y<sub>pi</sub>*, *z<sub>pi</sub>*) は, この電離電子 の親分子の位置座標の *x* (*y*, *z*) 成分を表す.

#### 4.1.5 手順 (viii)

電離電子による衝突励起・電離過程が起きたと きに、電離電子のエネルギーを起きた過程に応 じて、減少させる.この減少量は、励起過程では 標的分子の状態変化に必要なエネルギーのみ であるが、電離過程では、その状態変化のエネ ルギーに新たに発生した電離電子の初期エネル ギーを加える.動径線量計算では、これらの減少 したエネルギーの値を用いる.ただし、電離過程 では、新たに発生した電離電子は別の場所でそ のエネルギーを付与するので、この発生した電 離電子の初期エネルギーは動径線量に加算し ない.このエネルギーの減少量の動作確認は、r の大きい場所(ペナンブラ領域)での Chatterjee モデル及びCMCモデルとの比較で行った(詳細 は5節参照).

弾性散乱による電離電子から水分子へのエネ ルギー移行量(*E<sub>T</sub>*) [1, 45]

$$E_{T} = \frac{4m_{e}m_{W}E_{e}}{(m_{e} + m_{W})^{2}}\sin^{2}\frac{\theta_{ela}}{2}$$
(12)

は、以下の理由から考慮しない.ここで、 $m_W, E_e$ ,  $\theta_{ela}$ は, それぞれ、水分子の質量、電離電子のエ ネルギー、電離電子の弾性散乱角を表す.この とき、 $m_W \sim 33400 m_e$ なので、 $E_T < (4/33400) E_e$ となる.例えば、 $E_e \sim 5 \text{ eV}$ のとき、1回の衝突は 平均約 0.2 fs、すなわち、100 fs 間で 400回程度 起きる.このとき、エネルギー移行は、最大  $[\sin(\theta_{ela}/2) = 1 \text{ or} 366]$ で4×5×400/33400(~ 0.7) eV となる.最大のエネルギー移行はめった に起きないので、 $E_T$ は、さらに低く、非常に小さ いと判断できる.電離電子の衝突での水分子の 回転励起によるエネルギーの減少量はMuñozら の示した電子による水分子の阻止能の実験デー タの解析 [46] から, 無視できると判断した.

#### 4.1.6 手順(ix)

4.1.3 節で述べたように電離電子(*i* 番目の電離 電子を考える)の速度( $\vec{v}_e^{(i)}$ )は水分子イオン,水 分子の分極,他の電離電子の電荷によるクーロ ン力を考慮したニュートン方程式

$$\vec{F} = m_e \frac{d\vec{v}_e^{(i)}}{dt} = -\sum_{j \neq i} \frac{e^2 \vec{r}_{ij}}{4\pi\varepsilon_0 r_{ij}^3} + \sum_l \frac{q_l e\vec{r}_{il}}{4\pi\varepsilon_0 r_{il}^3}$$
(13)

から求める [12, 13, 15]. ここで,  $\varepsilon_0$ ,  $q_l$ ,  $\vec{r}_{ij(l)}$  は, それぞれ,真空中の誘電率,分子の電荷(イオン のときは 1, 中性分子のときは各原子に与えた分 極の値), i 番目の電離電子と j 番目の電離電子 (1番目の分子)との相対位置ベクトルを表す.こ の式の右辺の第一項(第二項)は, i 番目の電離 電子と ј 番目の電離電子(1番目の分子)とのクー ロン相互作用を表す. また,  $r_{ii(l)} = 0$  付近での発 散を避けるため、 $r_{ii(l)}$ を近似的に  $(r_{ii(l)}^2 + a_s^2)^{1/2}$ と する [25-27]. この計算では, as=0.1 nm を採用 する. 誘電率に関しては, 4.1.1 節で述べたように 水分子の分極の方向はランダムに決め、その方 向の変化は考慮しない(配向分極は無視する) ので,真空中での誘電率の値を用いる [31].こ のモデルに基づいて作成したコードの動作確認 は、単分子から発生する電離電子のエネルギー 減少量の計算で行った(詳細は 4.2.2 節参照). 一方,入射イオンの速度( $\vec{v}_{ion}$ )は,一定とする (4.1.2 節参照). 最後に, 入射イオン(電離電子) の位置ベクトルを $\vec{v}_{ion(e)} \times \Delta t$ だけ移動させる.

入射イオンの衝突過程により非常に多くの水 分子イオンが生成するが、これらの水分子イオン 同士のクーロン力からクーロン爆発を起こすと考 えられる.これにより、水分子イオンが作る電場が 変わるので、このシミュレーションにとって重要な 要因となるが、X線自由電子レーザー(XFEL)を 用いた生体分子の損傷 [26, 27, 47, 48]の研究 の例から以下の理由で考慮する必要はないと判 断した [12, 13]. (i)この XFEL の研究では、生 体分子中に存在する原子がイオンとなり、これら のイオン同士のクーロン力でクーロン爆発を起こ すと考えられ、本研究でのクーロン爆発と同じ機

構である.標的となる生体分子中には、数千個 から数万個の原子があるが、それらのほとんどす べてがイオンになると想定される.また、球状に 近い形の生体分子が標的として選ばれており, 個々のイオンは隣り合うすべてのイオンとなった 原子からのクーロン力を受けることとなる [26,27]. 一方で,本研究では,入射イオンの軌道近傍の ほぼ直線上に分子イオンは生成するので,直線 上以外の分子は中性のままであり, 個々の分子 イオンに隣り合う分子イオンの数は二つ以下とな り, 個々の分子イオンに掛かる力は, XFEL の研 究に比べ,かなり弱くなることが予測できる.(ii) XFEL の生体分子損傷の研究では、真空中にお いて5 fs 程度でクーロン爆発が起こると考えられ ていた [47]. それに対して, Hau-Riege らは生体 分子の周りを水で囲むカプセル状にすることを提 案し、このカプセルを使うことにより、まわりの水の 影響で生体分子がクーロン爆発を起こす時間が 50 fs と長くなることをシミュレーションで示した [48]. 本研究の場合でも, 非常に多くの中性の水 分子がこれらの分子イオンを取り囲んでおり, Hau-Riege ら [48] の場合と同様にクーロン爆発 が起きる時間は,遅くなると考えられる.(i)と(ii)の 二つの事項からクーロン爆発が起きる時間スケ ールは,数100fs以上と判断した.一方,動径線 量シミュレーションでは,照射後 100 fs で十分に 収束すると判断した(4.3節,5節の考察参照)の で、クーロン爆発は考慮しない.





#### 4.1.7 手順(xi)

統計的に十分なデータを得るために,初期値 が異なる乱数を使って,約 1000 通りの水分子の 配置を作りだし,それぞれに一個のイオンを入射 させてシミュレーションを行う.スーパーコンピュ ーターの並列化を使えば,入射イオンごとに 別々のコンピューターを用いて一度に計算でき る.乱数は,4.1.4 節で説明した手順(v)の電離 電子の初期エネルギーや放出角度を決めるの にも使用されている [式(10)参照].4.2.2 節, 4.2.3 節,5節(図6以降)の結果には,1000 個の 入射イオンの平均した値を用いる.また,tmax = 100 fs とした(4.3.5,5 節の考察参照).

#### 4.2 デモ

#### 4.2.1 水分子イオン生成 [12, 13]

入射イオンの衝突電離によって生成した水分 子イオン間距離のデモを行った.図5に3,10, 30,80 MeV/uのエネルギーを持つ一個のC<sup>6+</sup>イ オンを照射したときの水分子イオンの生成場所 の一例を示した. 生成した分子イオン間の間隔 の平均値は, 平均自由行程(*τ*<sub>ion</sub>)の式 [12, 13] から

$$\tau_{ion} = \frac{1}{n_m \sigma_{ion}} \tag{14}$$

と書ける. ここで,  $n_m$ ,  $\sigma_{ion}$  は, それぞれ, 水分子 の数密度, イオン衝突電離断面積を表す. C<sup>6+</sup> イオンの衝突電離断面積は, それぞれ, 3, 10, 30, 80 MeV/u のエネルギーに対して, 約 1.3 ×  $10^{-15}$ ,  $6 \times 10^{-16}$ ,  $2 \times 10^{-16}$ ,  $1 \times 10^{-16}$  cm<sup>2</sup> なので [35],  $\tau_{ion}$ は, 約 0.26, 0.56, 1.6, 3.2 nm となるが, 4.1.7 節で説明した手法(多くのイオンを異なる場 所に入射した時の平均値)により求めた分子イオ ン生成の間隔の平均値は, これらの値とほぼ一 致した [12, 13]. これにより手順(iii), (vi) (4.1.3 節参照)に基づいて作成したシミュレーションコ ードの動作が正常であると確認できた.

#### 4.2.2 水分子イオンの電場 [12-14]

我々の新規モデルの新しいところは, 電離電子



図 6:  $\Theta = 90^{\circ}(\blacktriangle), 60^{\circ}(\blacksquare), 30^{\circ}(\diamondsuit)$ での $\Delta E_{ep,sim}$ とrの関係. 入射イオンのエネルギーは (a) 3 MeV/u, (b) 10 MeV/u, (c) 30 MeV/u, (d) 80 MeV/u である.

Copyright© 2012 The Atomic Collision Society of Japan, All rights reserved.

の運動が分子イオン等の合成電場の力を受ける ことである(4.1.5 節の手順(vi)及び図 2 参照). この力は,自由電子ガスモデルにおける電離電 子に掛かる復元力、すなわち、イオンと物質との 相互作用により電荷の中性の状態が破れ、この 破れから生じる電場による引き戻す力と同等と考 えることができ、自由電子ガスモデルの利点を取 り入れたと判断した.ここでは、水分子イオンの 合成電場による電離電子の運動エネルギーの減 少量のデモの結果を示す.4.2.1 節のデモで生 成させた一つの水分子イオンから電離電子を発 生させる.この合成電場から脱出する際,電離電 子の運動エネルギーは減少するが、入射イオン の軌道付近に捕獲されるかどうかは, ve の入射イ オンの軌道に垂直方向の成分  $[v_{ep} (= v_e \sin \Theta)]$ で決まる.ここで, Θは入射イオンの軌道と電離 電子の運動方向との角度を表す. すなわち, ven が0になったとき、動径方向には捕獲されたと考 えることができる. そこで, vep の時間変化を式 (13)で計算し、それを運動エネルギーに変換し て、その変化(エネルギーの減少)からポテンシ ャルを求めた[14]. まず, Eeip,sim を

$$E_{eip,sim} = \frac{1}{2} m_e v_{eip}^2 = \frac{1}{2} m_e [v_{ei} \sin \Theta]^2$$
$$= E_{ei,sim} [\sin \Theta]^2$$
(15)

と定義する. ここで,  $v_{ei}$  と  $v_{eip}$  はそれぞれ,  $v_e$  と vepの初期値を表す.この式から、Θ = 90,60,30° に対して、それぞれ、*Eeip.sim* = *Eei.sim*, *Eei.sim,p* = 0.75  $E_{ei.sim}$ ,  $E_{ei.sim,p} = 0.25 E_{ei.sim}$ , すなわち,  $E_{ei.sim}$ = 100 eV のとき, それぞれ, Eei.sim.p ~ 100 eV, 75 eV, 25 eV になる. このデモでは, 単純にするた め,式(11)に, $r_{ie0} = 2 a_B, \theta = \Theta, \phi = 0$ を代入し て、電離電子の初期の位置を $(x_{pi} + 2 a_B \sin \Theta, y_{pi})$  $z_{pi} + 2 a_B \cos \Theta$ )とした. ここで,  $a_B$  はボーア半径 を表す.最初に、標的を一個の水分子のみとし、 その分子から電子が放出された場合のこの電子 のエネルギーの減少量を計算した.この結果, rse =∞(5 nm) で理論値 13.6 eV にほぼ一致した. 複数の水分子イオンを取り扱う場合,エネルギー の減少量は、同じシミュレーションコードを用いて、 個々の水分子イオンとのクーロン相互作用を計



図 7: 入射粒子の軌道から1 nm 以内に捕獲され る電離電子の確率と入射イオンのエネルギーとの 関係. 電離電子間の相互作用を無視した場合 (▲),電子衝突励起・電離過程によりエネルギー の減少量を無視した場合(■), すべてを考慮した 場合(●)を示した.

算し、その合計からエネルギーの減少量を決定 できるので、この一致により手順(ix)(4.1.6 節参 照)に基づいて作成したシミュレーションコードが 正常に動作したと確認できた.

図 6 に、 $\Theta = 90^{\circ}, 60^{\circ}, 30^{\circ}$ での $\Delta E_{ep.sim}$  と r との 関係を示した.ここで、 $\Delta E_{ep,sim}$ は、 $E_{ep,sim}$ (=1/2 *m*<sub>e</sub>*v*<sub>ep</sub><sup>2</sup>)のエネルギーの減少量を表す.入射イ オンが 3 MeV/u の C<sup>6+</sup>イオンの場合, Θに関係な く, 軌道から 1 nm(5 nm)の場所でのAEep.sim は 約 20 eV (40 eV)となる. このとき,  $\Theta = 90^{\circ}, 60^{\circ},$ 30°に対して、それぞれ、 △Ee,sim = 22 eV, 30 eV, 88 eV(40 eV, 50 eV, 160 eV)に相当する [AEe.sim =  $\Delta E_{ep,sim}/(\sin \Theta)^2$ より]. 実験値では、ほとんどすべ ての Eei,exp が 20 eV 以下 [35], すなわち, Eei,sim が 30 eV 以下である. これから, Θ ≤ 60° に対し て, 軌道から1nm の場所で捕獲され, Θのすべ ての値に対して、5 nm 以内の場所に捕獲される ことになる. 一方, 80 MeV/u では,  $\Theta = 90^{\circ}, 60^{\circ},$ 30°に対して, 軌道から 1 nm(5 nm)の場所での  $\Delta E_{ep,sim}$  lt, 12.4 eV, 9.6 eV, 4 eV (14 eV, 11 eV, 5 eV) b taot. In  $\delta O \Delta E_{ep,sim}$  it,  $\Theta = 90^{\circ}, 60^{\circ},$ 30°に対して、それぞれ、 $\Delta E_{e,sim}$  = 12.4 eV, 12.8 eV, 16 eV(14 eV, 14.6 eV, 20 eV)に相当する. す なわち, $\Theta \ge 60^{\circ}$ では 5 nm 以下では捕獲され ず, Θ ≤ 30°に対しても, E<sub>ei.sim</sub> > 20 eV では捕獲 されないことがわかった.

次に,電離電子が入射イオンの軌道付近に捕 獲される確率を調べた [12,14]. 図7に入射イオ ンの軌道から1nm以内に捕獲される確率と入射



図 8: 照射後(a)1 fs, (b) 2 fs, (c) 4 fs, (d) 10 fs で の入射イオンの軌道から 1 nm 以内に捕獲される 電離電子のエネルギー分布( $\bullet$ ).入射イオンは 3 MeV/u の炭素イオン.式(16)で示したマクセル分 布(—,—)も図に挿入 [ $T_e$  = (a) 7 eV(赤線), 5 eV(黒線), (b) 7 eV, (c) 6 eV, (d) 5 eV].

イオンのエネルギーとの関係を示した.図6では、 単純化するため、電離電子のエネルギーの減少 に対して、水分子イオンのクーロン力のみ考慮し たが、実際の電離電子に働く力は、式(13)で与 えられ、水分子のクーロン力(右辺第二項)のほ かに、他の電離電子のクーロン力(右辺第一項) が掛かる.また、電離電子は、他の中性の分子と 衝突し、中性分子を励起や電離させるが、その 際、電離電子のエネルギーは減少する.このエ ネルギーの減少も捕獲確率に影響を与えること が予測できる.図7には、(i)電離電子間のクー ロン相互作用[式(13)の右辺の第一項]の影響と (ii)電子衝突過程によるエネルギーの減少を無 視した場合の捕獲確率も示し、(i)と(ii)の捕獲 確率への影響を調べた.

イオンエネルギーの増加に伴い, 捕獲確率が 減少していることがわかった. これは, 生成する 分子イオン間の間隔が長くなり(図5参照), 合成 電場の強さが減少するためと考えた.

3 MeV/u のイオンエネルギーのとき,捕獲確率が電離電子間の相互作用を考慮すると,約

15%減少する.入射イオンの軌道に近い位置に 捕獲された電離電子は、イオンの電荷を打ち消 す(スクリーニングの)ように働く.すなわち、電離 電子間の相互作用は捕獲確率を減らす.入射イ オンのエネルギーが高くなるにつれて、この減少 する割合(スクリーニングの効果)は、減ることが わかった.これは、入射イオンのエネルギーが高 くなるにつれて、イオン衝突で生成した分子イオ ンの間隔が長くなり(図 5 参照)、電離電子間の 距離も長くなることが原因と考えられる.

電離電子の衝突過程によるエネルギーの減少 量は、捕獲確率にほとんど影響しないこともわか った.1 nmの領域では、電離電子の衝突過程が 起きる頻度が小さいことが原因である.電離電子 のエネルギーが 30 eV 以下のとき、電離電子の 衝突過程の全断面積は  $1 \times 10^{-17} - 5 \times 10^{-17}$  cm<sup>2</sup> となるので、平均自由行程 [式(14)参照] は 1 nm よりも非常に長く、6 - 30 nm と見積もれた.

ここでのデモから我々の新規シミュレーションモ デルと二つの理論モデルとの関係を考察する. ここでのシミュレーションの特徴は,図6で示した ように合成電場の強さが入射イオンのエネルギ ーに依存していることである.3 MeV/u のときは, 電場は非常に強く,多くの電離電子は合成電場 に捕獲される.すなわち,電離電子と分子イオン 間の相互作用が強くなり,一部の電離電子が入 射イオンの衝突で生じた分子イオンの電場の復 元力を考慮した自由電子ガスモデルの特色の一 つである電離電子を引き戻す力の効果が現れる. その結果, Chatterjee モデルの様に,コア領域で の動径線量が1/r<sup>2</sup>の法則に従わず,突然増大す ると考えられる.

一方, イオンエネルギーが高くなるにつれて, これらの相互作用が弱くなるため, この捕獲が起 こりにくくなり, 電離電子を引き戻す力の効果が 弱くなり, CMC モデルの様に, コア領域でも 1/r<sup>2</sup> の法則に従うと考えられる. すなわち, 我々の新 規シミュレーションモデルでは, 入射イオンのエ ネルギー領域により動径線量分布が CMC と Chatterjee モデルのどちらの傾向を示すかを自 動的に振り分けられると期待できる.



図 9: 入射イオンの軌道から 1 nm 以内に捕獲される電離電子の  $T_e$ の時間変化. 炭素イオンのエネルギーは 3 MeV/u (×), 8 MeV/u (●), 12MeV/u (▲), 15 MeV/u (◆), 30 MeV/u (■).

4.3 電子温度の時間変化の結果 [15, 16]

水分子イオンの合成電場で捕獲された電離電 子のエネルギーの大部分は、入射イオンの軌道 付近の標的分子に付与される.このエネルギー 付与は、rの小さい領域(Chatterjee モデルでの コア領域)での動径線量を増加させる.ここでは、 入射イオンの軌道付近での電離電子のエネルギ ー付与を評価するため電離電子の電子温度(*T*<sub>e</sub>) の時間変化を求めた.

図 8 は, 3 MeV/u の C<sup>6+</sup> イオンの照射後 1, 2, 4, 10 fs での入射イオンの軌道から 1 nm 以内に 捕獲された電離電子のエネルギー分布を示した. 電離電子となった電子のエネルギー分布と一致 するマクセル分布関数

$$f(E_e) = A\sqrt{E_e} \exp(-\frac{E_e}{T_e})$$
(16)

も加えて,  $T_e$ を求めた. ここで, A は規格化定数 である. 照射後 1 fs では一致するマクセル分布 は見つからなかったが, 照射後 2, 4, 10 fs ではそ れぞれ,  $T_e = 7, 6, 5$  eV のとき電離電子のエネル ギー分布とマクセル分布が良い一致を示した. 電離電子間のクーロン相互作用 [式(2)の右辺 の第二項] がこの一致が引き起こしたと考えられ る [15].

図9に3,8,12,15,30 MeV/uのC<sup>6+</sup>イオン照射 での電子温度の時間変化を示した.電子温度は, 4 eV程度までは急激に減少するが,それよりも低 くなると、ゆっくり減少するようになる.これは、電離電子となった電子が分子を電子励起や電離させるのに十分なエネルギーを持てなくなることが原因と考えられる.動径線量は、3節で述べたように、標的分子の衝突励起・電離過程によるエネルギーの減少量から計算する.それ故に、図9から動径線量の計算には、*tmax*を100fsとすれば十分に収束していると判断した.

図 9 から入射イオンエネルギーの減少に伴い, 電子温度が遅く減少することもわかった.この原 因を考察する.エネルギー付与が電子衝突励 起・電離過程で起きているので,標的が単位体 積当りに時間  $t \ge t + \Delta t$ の間の得たエネルギー  $\Delta E_T$ は

$$\Delta E_T(\Delta t) = (V_{01}R_{01}P_0 + V_{02}R_{02}P_0 + V_{12}R_{12}P_1)$$

(17)

となる. ここで,  $P_i$ は標的分子の i 状態のポピュレ ーション,  $R_{ij}$ は i 状態から j 状態に遷移する反応 レート,  $V_{ij}$  はその遷移を起こすときに必要なエネ ルギー, 状態 0, 1, 2 は, それぞれ, 分子の基底 状態, 励起状態, イオン状態を表す. 一方, 電離 電子となった電子の平均エネルギー ( $E_{ea}$ )は,

$$E_{ea} = \frac{\int_{0}^{\infty} E_{e} f(E_{e}) dE_{e}}{\int_{0}^{\infty} f(E_{e}) dE_{e}} = \frac{3}{2} T_{e}$$
(18)

である [15]. このとき, 電離電子が  $t \ge t + \Delta t$  の間 に標的に付与した単位体積当りの全エネルギー は,  $E_{loss} (\Delta t) = E_{ea} (t) N_e(t) - E_{ea} (t + \Delta t) N_e (t + \Delta t)$ である. ここで,  $N_e (t)$  は, t での電子の数密度を 表す.  $E_{loss} (\Delta t) = \Delta E_T (\Delta t)$ より以下の式が成り立つ [16].

$$T_{e}(t + \Delta t) = \frac{T_{e}(t)N_{e}(t)}{N_{e}(t + \Delta t)} - \frac{2\Delta t(V_{01}R_{01}P_{0} + V_{02}R_{02}P_{0} + V_{12}R_{12}P_{1})}{3N_{e}(t + \Delta t)}$$
(19)

イオンのエネルギーの増加に伴い、衝突電離断 面積が小さくなるため、入射イオンの軌道付近の P<sub>0</sub>は、入射イオンエネルギーが低くなると減少す る [16]. P<sub>0</sub>の減少が電子温度を遅く減少させる 原因と考えることができる. P<sub>1</sub>及び N<sub>e</sub>(t)の変化も 要因になるが、 $P_1$ の値は小さく、 $N_e(t)$ の変化は ゆっくり起きることが以前の研究 [16] でわかっ ている.ここで議論した電子温度の時間変化は、 次節で紹介する動径線量分布に直結する.

# 5. 動径線量分布:従来のモデルとの比 較検討 [15]

3 節で示したように動径線量は、電離電子が水 分子に対して衝突励起・電離過程を起こしたとき のエネルギーの減少量から見積もる.そこで、電 離電子が衝突励起・電離を起こした場所とエネ ルギーの減少量を記録し、それらを用いて動径 線量 [*D<sub>r</sub>*(*r*)] は、

$$D_{r}(r) = \frac{U_{ion}N_{ion}(r - \Delta r, r + \Delta r)}{\pi \{(r + \Delta r)^{2} - (r - \Delta r)^{2}\} ld_{t}} + \frac{U_{exc}N_{exc}(r - \Delta r, r + \Delta r)}{\pi \{(r + \Delta r)^{2} - (r - \Delta r)^{2}\} ld_{t}}$$
(20)

の式から計算する.ここで, $d_i$  は標的の密度,l は粒子線の移動距離, $U_{ion(exc)}$  は標的分子の電

ペナンブラ領域では、三つのモデルで計算し た分布が良い一致を示した.この一致により、高 いエネルギーを持つ電離電子では、我々のシミ ュレーションが従来のモデルを再現したこと、す なわち、手順(viii)(4.1.5 節参照)のモデルを基 に作成したシミュレーションコードが正常に動作 していることが確認できた.

一方,コア領域では,他の手法での結果との 間に相違が生じた.入射イオンエネルギーが 5 MeV/u では,分子イオンなどの合成電場を考慮



図 10: 動径線量と炭素イオン [(a) 5 MeV/u, (b) 8 MeV/u, (c) 10 MeV/u, (d) 12 MeV/u] の軌道からの 距離(r)との関係.  $t_{max}$ =5 fs( $\blacksquare$ ), 50 fs( $\bigcirc$ ), 100 fs( $\diamondsuit$ ), CMC モデル( $\blacktriangle$ )と Chatterjee モデル (---)での動径線量分布を示した.

Copyright© 2012 The Atomic Collision Society of Japan, All rights reserved.

すると、 $D_r$ は  $r \sim 0$ 付近で、 $t_{max} = 100$ fsのとき、 約3倍に増加する. すなわち, 入射イオンのエネ ルギーが数 MeV/u 程度の領域では, 電離電子 の入射イオンの軌道付近に捕獲されることが動 径線量に大きな影響を与えること, 動径線量が Chatterjee モデルのようにコア領域で 1/r<sup>2</sup>の法則 に従わず,突然増大することを実証した.また, tmax=50 fs と 100 fs の結果の間でほとんど差がな いことから,  $t_{max} = 100$  fs でほぼ収束していること もわかった.入射イオンのエネルギーが増えるに つれて、CMC モデルの結果との差は小さくなっ た. また, 入射イオンエネルギーが増えるにつれ て、Chatteriee モデルの結果と相違が大きくなっ た.これらの相違が起きるのは、入射イオンのエ ネルギーが高いとき、二体衝突モデルが良くなり、 低いとき,自由電子ガスモデルが良くなるためで あると考えることができる. 前述のように, イオンエ ネルギーが高くなるにつれて,生成する水分子イ オンの間隔が長くなり、電離電子と分子イオン間 距離も長くなる.このことにより、電離電子に働く 軌道に引き戻す力が弱くなり, 電離電子を入射イ オンの軌道付近に捕獲する頻度が減ると予測で きる. 我々のシミュレーションモデルでは, 入射イ

オンのエネルギーが低いとき,4.2.2 節で示した 分子イオンの合成電場が強くなり,多くの電離電 子が入射イオンの軌道付近に捕獲されるが,エ ネルギーが高くなると,この電場が弱くなり,自動 的に捕獲の起きる頻度が減るようになる.すなわ ち,入射イオンのエネルギー領域により動径線 量分布が CMC モデルの傾向(コア領域では1/r<sup>2</sup> の法則に従う)を表す場合, Chatterjee モデルで の傾向(コア領域でも 1/r<sup>2</sup>の法則に従わない)を 表す場合を自動的に振り分けることができたと考 えられる.

#### 6. まとめ

重粒子線癌治療の治療計画などに使われてい る動径線量分布での問題点、その問題解決に向 けて、入射イオンの衝突電離で生成された分子 イオンからのクーロン力による電子の引き戻し効 果を自由電子ガスモデルでのプラズマ振動励起 の効果と同じであると考えて、新たに開発した 我々のモデルと従来のモデルとの関係性の考察 から得た知見の解説を行った.

動径線量分布計算には、入射荷電粒子に対 する電子の応答を二体衝突モデルと自由電子ガ



図 11: 物理過程から化学過程への電子衝突過程等のシナリオ.

スモデルで記述できると仮定した二通りのモデル が使われている(本記事では, それぞれ, CMC モデル, Chatterjee モデルと名付けた.3節参照). CMC モデルでは動径線量が単独運動する電子 にのみ起因するのに対して, Chatterjee モデルで は、単独運動する電子だけでなくプラズマ振動 にも起因する.これらのモデルが正しく物理現象 を記述できるかは検証されていないにもかかわら ず,どちらか一方のモデルに基づいて(他の一 方を無視して)導出された大きな相違のある二通 りの動径線量分布が重粒子線癌治療の治療計 画などに使われている. そこで、この二通りのモ デルの特徴を合わせ持つ可能性のあるシミュレ ーションモデルの開発を進めた.二体衝突モデ ルを基盤として、それに入射イオンの衝突電離 で生成したイオンからのクーロン力による電子の 引き戻し効果を導入した手法を開発した. 我々 は、この効果を自由電子ガスモデルでのプラズ マ振動による動径線量への効果と同等とみなし ている.

重粒子線が標的中を通過するとイオン衝突電 離過程で生成した分子イオンにより電場を形成 する. 電離電子の運動がこの電場の影響を受け るシミュレーションを初めて行い、電離電子が入 射イオンの軌道付近に捕獲されることがわかった. すなわち、二体衝突モデルでも一部の電離電子 が復元力(引き戻す力)を受けて、ある領域に捕 獲されることを明らかにした. 次に, この軌道付近 に捕獲された電離電子の動径線量の影響を調 べたが, 重粒子線のエネルギーが低い場合は, その影響は大きいが,エネルギーが増加するに つれて小さくなることがわかった.これは、入射イ オンのエネルギーが高くなるにつれて、生成され る分子イオン間の距離と電離電子間の距離が長 くなり、捕獲する頻度が減るためである. すなわ ち,入射イオンのエネルギーが高くなるにつれて, 動径線量分布が Chatterjee モデルの傾向から CMC モデルの傾向を示すように移行すると考え ることができる.

従来の手法では、二通りモデルのうち、どちら か一方のモデルのみを使用したものであったの に対して、我々の新規モデルは、二通りの理論 モデルの特徴を合わせ持つモデルを開発した. これは、第三の選択を提示したことに相当する. この第三の選択である我々の新規シミュレーショ ンモデルでは、入射イオンのエネルギー領域に より電離電子の運動が CMC モデルの傾向(コア 領域でも  $1/r^2$  の法則に従う)を表す場合、 Chatterjee モデルの傾向(コア領域では  $1/r^2$ の法 則に従わない)を表す場合を自動的に振り分け ることができた.

今回開発したモデルは、イオンと物質の相互作 用に伴う物理現象のより深い解明,動径線量分 布の問題の解決、クラスターDNA 損傷の生成過 程の理解,重粒子線の研究での原子分子物理 の役割の理解に繋がり、原子分子物理、プラズ マ物理、放射線物理、生命医科学の発展に貢献 することが期待できる.

#### 7. **今後の展開**

従来のモデルでは,動径線量は,電子(電離 電子)の衝突電子励起・電離過程によるエネル ギーの減少量から評価されている. 我々の新規 モデルでも同じ過程から動径線量を評価した.イ オン入射後100 fsの時点で電離電子となった電 子のエネルギーは水分子の電子励起や電離を 起こせないぐらい低くなっていた. それ故に, 動 径線量シミュレーションとしては, 100 fs で十分と 判断した.しかしながら,これらの低エネルギー 電離電子は、図 11 に示すように長い時間を掛け て弾性散乱により標的の温度を増加させ,再結 合過程,電子・分子間の捕獲解離,分子の回転 励起などを起こし、エネルギーを減少しながら放 射線生物学で使用されている化学的過程 [49] へと移行する. そこで, 次の計画として 100 fs 以 降の物理的過程 [49] から化学的過程への移 行中での物理現象の解明を目指す.これは,原 子分子・プラズマ物理, 放射線物理・化学・生物 学など多分野の研究を結びつける架け橋となる ことが期待できる.日本放射線化学会学会誌の 巻頭 [50] で「最近の話題は,線質効果と超高 速過程があげられる.実は、両者は切り離せない 関係にあり,線質効果を追求していくと,必然的 にその初期過程が重要になってくる場合が多い」 と指摘されているが,放射線化学の分野でも,こ の移行中の過程が重要な研究対象になると考え

られる.

さらに、本解説では標的は水のみとしたが、水 中に DNA を挿入した標的も取り扱う予定である. 電子・DNA の部位間の捕獲解離過程では、この 過程のエネルギーの減少量は数 eV と電子励起 や電離(一回の衝突に対して、エネルギーの減 少量は 10-30eV 程度)より低く, 動径線量の評価 では無視できるが、DNA 損傷への効果としては 無視できない [51]. さらに,水分子イオンのクー ロン爆発 [47,48] も取り扱うことを予定している. これらの分子イオンは,非常に多く存在し,クー ロン爆発によりDNAと衝突して、大きな損傷を与 えることが予測できる. そのためには、分子動力 学(MD) [25] をシミュレーションモデルに取り入 れる必要がある.このような低エネルギーの電離 電子や分子イオンの DNA 損傷への効果は,式 (1)の非線形効果として与えられているかもしれ ない.しかしながら,式(1)は物理的な根拠が曖 味で,動径線量のみの関数として生物学的効果 比の説明ができるかは疑わしい. 将来の我々の シミュレーションでクラスターDNA 損傷の生成を 高精度に評価でき,さらに正確に生物学的効果 比が理解できるようになることを期待する.

#### 謝辞

大澤大輔博士,入来仁隆博士,土田秀次博 士,伊藤秋男教授(京大),剣持貴弘博士,和 田元教授(同志社大),赤松憲博士,ジェームス 甲賀博士,鹿園直哉グループリーダ,田中淳ユ ニット長,南波秀樹理事(原子力機構)に有用な 議論をしていただき,感謝したいと思います.本 シミュレーションは原子力機構東海研のスーパ ーコンピューター 'PRIMERGY BX900'を使用 しました.また,本研究は,科学研究補助金(課 題番号:25390131)のサポートの基に遂行してお ります.

#### 参考文献

- J. F. Ziegler, J. P. Biersack, and M. D. Ziegler, 'SRIM : The Stopping and Range of Ions in Matter', SRIM Co. Chap. 1 - 3 (2008).
- [2] 伊藤憲昭, "放射線物性 I"森北出版株式会社 (1981) 第7章.

- [3] G. Kraft, M. Krämer, and M. Scholz, Radiat. Environ. Biophys. **31**, 161 (1992).
- [4] R. Katz, B. Ackerson, M. Homayoonfar, and S.C. Sharma, Radiat. Res. 47, 402 (1971).
- [5] A. Chatterjee and H.J. Schaefer, Radiat. Environ. Biophys. **13**, 215 (1976).
- [6] J.L. Magee and A. Chatterjee, J. Phys. Chem. 84, 3529 (1980).
- [7] M. Krämer and M. Scholz, Phys. Med. Biol. 45, 3319 (2000).
- [8] M. Krämer and M. Scholz, Phys. Med. Biol. 51, 1959 (2006).
- [9] R.B. Hawkins, Radiat. Res. 140, 366 (1994).
- [10] R.B. Hawkins, Radiat. Res. 160, 61 (2003).
- [11] Y. Kase, T. Kanai, N. Matsufuji, Y. Furusawa, T. Elsässer, and M. Scholz, Phys. Med. Biol. 53, 37 (2008).
- [12] K. Moribayashi, Phys. Rev. A. 84, 012702 (2011).
- [13] K. Moribayashi, Rad. Phys. Chem. 85, 36 (2013).
- [14] K. Moribayashi, Nucl. Instru. Meth. Phys. Res. B 314, 30 (2013).
- [15] K. Moribayashi, Rad. Phys. Chem. 96, 211 (2014).
- [16] K. Moribayashi, JPS Conf. Proc., 1, 013089 (2014).
- [17] Y. Hase, R. Yoshihara, S. Nozawa, and I. Narumi, Mutation Res. 731, 41 (2012).
- [18] A. Tanaka, N. Shikazono, and Y. Hase, J. Radiat. Res. 51, 223 (2010).
- [19] D.T. Goodhead, Int. J. Radiat. Biol. 65, 7 (1994).
- [20] J.F. Ward, Int. J. Radiat. Biol. 66, 427 (1994).
- [21] N. Shikazono, M. Noguchi, K. Fujii, A. Urushibara, and A. Yokoya, J. Radiat. Res. 50, 27 (2009).
- [22] M. Hada and A.G. Georgakilas, J. Radat. Res. 49, 203 (2008).
- [23] S.F. Shimobayashi, T. Iwaki, T. Mori, and K. Yoshikawa, J. Chem. Phys. **138**, 174907 (2013).
- [24] A.E. Brenner, Science, 14, 1401 (1997).

- [25] Z. Jurek, G. Faigel, and M. Tegze, Eur. Phys. J. D 29, 217 (2004).
- [26] K. Moribayashi, Phys. Rev. A 80, 025403 (2009).
- [27] K. Moribayashi, J. Phys. B 43, 165602 (2010).
- [28] J. Lindhard and A. Winther, Mat. Fys. Medd. Vid. Selsk. 34, 1 (1964).
- [29] S. Uehara, L.H. Toburen, W.E. Wilson, D.T. Goodhead, and H. Nikjoo, Radat. Phys. Chem. 59, 1 (2000).
- [30] S. Uehara and H. Nikjoo, J. Phys. Chem. B 106, 11051 (2002).
- [31] M.N. Varma, J.W. Baum, and A.V. Kuehner, Radiat. Res. 70, 511 (1977).
- [32] A. Chatterjee, H.D. Maccabee, and C.A. Tobias, Radiat. Res. 54, 479 (1973).
- [33] S.B. Zhu, S. Yao, J.B. Zhu, S. Singh, and G.W. Robinson, J. Phys. Chem. 95, 6211 (1991).
- [34] C. Rønne, L. Thrane, P. Åstrand, A. Wallqvist, K.V. Mikkelsen, and S.R. Keiding, J. Chem. Phys. 107, 5319 (1997).
- [35] C.D. Cappello, C. Champion, O. Boudrioua,
   H. Lekadir, Y. Sato, and D. Ohsawa, Nucl. Instru. and Meth. Phys. Res. B 267, 781 (2009).
- [36] O.J. Orient and S.K. Srivastava, J. Phys. B 20, 3923 (1987).
- [37] H.P. Pritchard, V. McKoy, and M.A.P. Lima, Phys. Rev. A 41, 546 (1990).
- [38] T. Nishimura and Y. Itikawa, J. Phys. B 28, 1995 (1995).
- [39] W. Lotz, Z. Physik, 232, 101 (1970).
- [40] T. Fujimoto, 'Plasma Spectroscopy' edited by
  J. Birman *et al.*, Clarendon press Oxford (Oxford science publications), chapter 5, (2004).
- [41] P. Rawat, V.S. Prabhudesai, G. Aravind, M.A. Rahman, and E. Krishnakumar, J. Phys. B 40, 4625 (2007).
- [42] M.E. Rudd, Y.K. Kim, D.H. Madison, and T.J. Gay, Rev. Mod. Phys. 64, 441 (1992).
- [43] C. Champion, O. Boudrioua, C. D. Cappello,Y. Sato, and D. Ohsawa, Phys. Rev. A 75 032724 (2007).

- [44] S. Nakazaki, M. Nakashima, H. Takebe and K. Takayanagi, J. Phys. Soc. Japan 60, 1565 (1991).
- [45] 高柳和夫, "電子·原子·分子の衝突"培風 館 (1972) 221.
- [46] A. Muñoz, J.C. Oller, F. Blanco, J.D. Gorfinkiel, P. L. Vieira, and G. García, Phys. Rev. A 76, 052707 (2007).
- [47] R. Neutze, R. Wouts, D. Spoel, E. Weckert, and J. Hajdu, Nature 406, 752 (2000).
- [48] S.P. Hau-Riege, R. London, A. Szoke, Phys. Rev. E 69, 051906 (2004).
- [49] 江島洋介,木村博,"放射線技術学シリーズ 放射線生物学"日本放射線技術学会監修 (2002) 6.
- [50] 吉田陽一, 日本放射線化学会学会誌 89, 1 (2010).
- [51] K. Aflatooni, A.M. Scheer, and P.D. Burrow, J. Chem. Phys. **125**, 054301 (2006).

### 2014 年度 役員·委員会

#### 会長

髙橋正彦 (東北大学)

#### 幹事

城丸春夫	(首都大学東京)	〔副会長〕	加藤太治	(核融合科学研究所)
中井陽一	(理化学研究所)		渡邊 昇	(東北大学)

#### 運営委員

東 俊行	(理化学研究所)	岡田邦宏	(上智大学)
小田切丈	(上智大学)	佐甲徳栄	(日本大学)
城丸春夫	(首都大学東京)	中村信行	(電気通信大学)
星野正光	(上智大学)	森下 亨	(電気通信大学)
市村 淳	(宇宙科学研究所)	鵜飼正敏	(東京農工大学)
加藤太治	(核融合科学研究所)	北島昌史	(東京工業大学)
田沼 肇	(首都大学東京)	長嶋泰之	(東京理科大学)
中井陽一	(理化学研究所)	渡邉 昇	(東北大学)

#### 常置委員会

庶務委員会	委員長:渡邉 昇	(東北大学)
編集委員会	委員長:中井陽一	(理化学研究所)
行事委員会	委員長:加藤太治	(核融合科学研究所)
広報渉外委員会	委員長:城丸春夫	(首都大学東京)
顕彰委員会	委員長:鵜飼正敏	(東京農工大学)

編集委員 岸本直樹,北島昌史,冨田成夫,中井陽一, 彦坂泰正,日高宏,間嶋拓也,森林健悟



THE ATOMIC COLLISION SOCIETY OF JAPAN しようとつ 第11巻第3号 (通巻58号) Journal of Atomic Collision Research ⑥原子衝突学会2014 http://www.atomiccollision.jp/ 発行:2014年5月15日 配信: 原子衝突学会事務局 <<u>acr-post@bunken.co.jp</u>>