

IRSN

INSTITUT
DE RADIOPROTECTION
ET DE SÛRETÉ NUCLÉAIRE

Derniers développements du code Monte Carlo Geant4 pour la simulation des traces à l'échelle moléculaire dans l'eau liquide

Ziad FRANCIS & Carmen VILLAGRASA, DRPH/SDE/LDRI

SFRP Journées codes de calcul en radioprotection, radiophysique et dosimétrie
Sochaux, 28-29 Avril 2010

Plan

- Besoins spécifiques d'un code de simulation de traces à l'échelle nanométrique
- La collaboration Geant4
- Nouveaux processus implémentés : Geant4-DNA
- Quelques applications

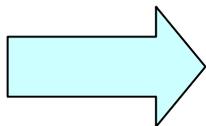
Les codes de simulation des traces à l'échelle nanométrique

Besoin :

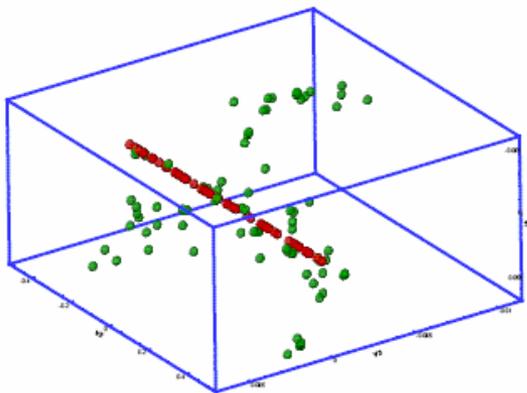
Peut on relier les caractéristiques d'une irradiation et les effets biologiques radio-induits?

Les dommages créés par l'irradiation sont visibles et « compréhensibles » au niveau subcellulaire -> échelle moléculaire (nanométrique)

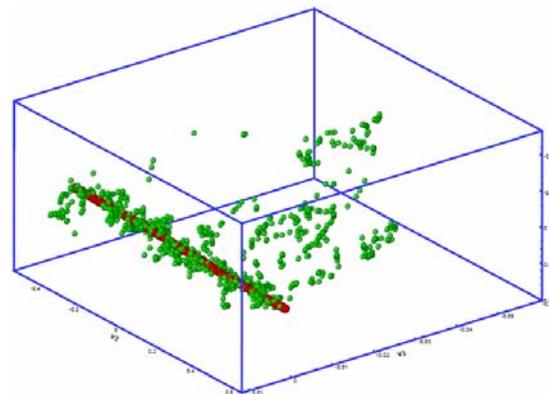
Besoin d'une description de l'interaction au même niveau de précision spatiale



Description des **interactions** des **électrons** jusqu'à leur **thermalisation**



E coupure: 250 eV



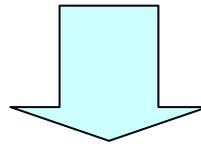
E coupure: 15 eV

Les codes de simulation des traces à l'échelle nanométrique

Des codes Monte Carlo dédiés à la simulation des dommages à l'ADN existent, ex: PARTRAC, TRIOL, PITS, KURBUC, OREC, NOREC, ...

Certains, incluent également les étapes suivant l'interaction physique : physico-chimique, chimique et même des descriptions de réparation cellulaire (PARTRAC)

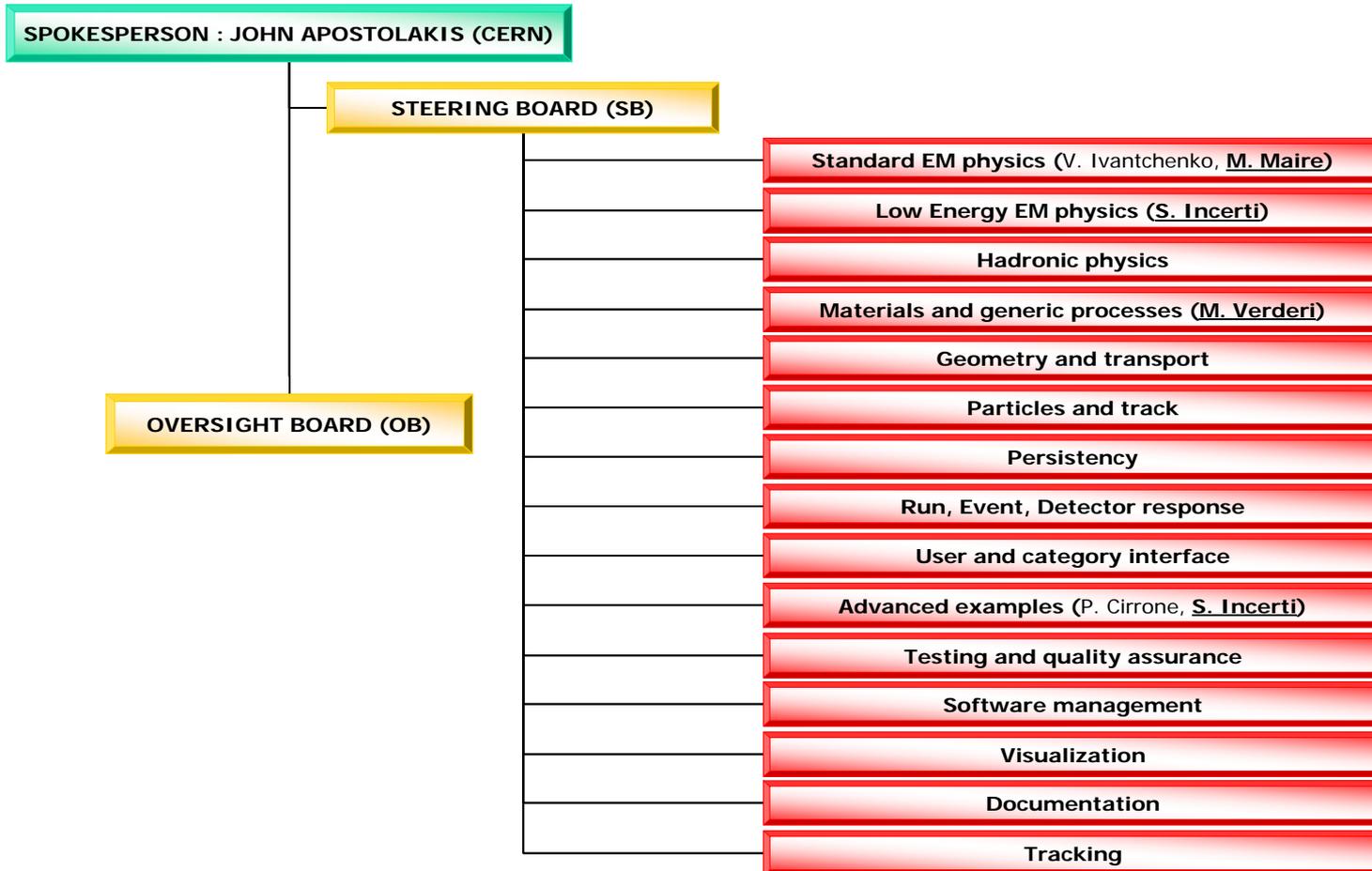
Mais : Codes dédiées (approximations etc.), difficilement accessibles et de difficile appropriation



Geant4

- **GEANT4** offre une plateforme commune mais très flexible permettant la modification de l'outil pour chaque application
- Les utilisateurs ont accès librement au code source

La collaboration GEANT4-DNA



La collaboration GEANT4-DNA

Des **nouveaux processus** ont été introduits dans la partie “Low energy”, processus électromagnétiques :
G4DNA”nomprocessus”.cc

Pour chaque processus (ionisation, excitation, etc.) un ou plusieurs **modèles** sont accessibles : **G4DNA”nommodel”.cc**

Ils permettent la **description** des **interactions** de différents particules (**alphas**, **protons** et **électrons**) avec de l'**eau liquide** en utilisant **5 états d'excitation** et **5 états d'ionisation** du milieu

Nouveaux processus implémentés en GEANT4 (Gean4-DNA)

Particule	Processus	Modèle	Range
Electrons	Ionisation	Born (avec corrections)	11 eV - 1 MeV
	Elastique	Rutherford ou Champion	0 eV - 10 MeV
	Excitation	Born (Emfietzoglou)	8.23 eV - 10 MeV
	Excitations vibrationnelles du milieu	Michaud et Sanche (données expérimentales)	0.025 eV-100 eV
Protons	Excitation	Miller & Green	10 eV - 500 keV
		Born (Emfietzoglou ou Dingfelder)	500 keV - 100 MeV
	Ionisation	Rudd	100 eV - 500 keV
		Born(Emfietzoglou ou Dingfelder)	500 keV - 100 MeV
	Transfert de charge	Dingfelder	1 keV - 10 MeV

Nouveaux processus implémentés en GEANT4 (Gean4-DNA)

Particule	Processus	Modèles	Range
Hydrogène	Ionisation	Rudd	100 eV - 100 MeV
	Transfert de charge (Stripping)	Miller & Green	1 keV - 10 MeV
Alpha+ & Helium	Excitation	Miller & Green	1 keV - 10 MeV
	Ionisation	Rudd	1 keV - 10 MeV
	Transfert de charge (diminution excepté pour l'He)	Dingfelder	1 keV - 10 MeV
	Transfert de charge (augmentation)	Dingfelder	1 keV - 10 MeV
Alpha++	Excitation	Miller & Green	1 keV - 10 MeV
	Ionisation	Rudd	1 keV - 10 MeV
	Transfert de charge (diminution)	Dingfelder	1 keV - 10 MeV

Première approximation de Born pour le calcul des sections efficaces des collisions inélastiques

La **section efficace doublement différentielle** des collisions inélastiques pour les protons :

$$\frac{d^2\Sigma}{dE.dK} = \frac{1}{\pi.a_0.T} \frac{1}{K} \text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon(E,K)} \right]$$

Énergie transférée

Moment transféré

Energie cinétique du projectile

Masse du projectile M

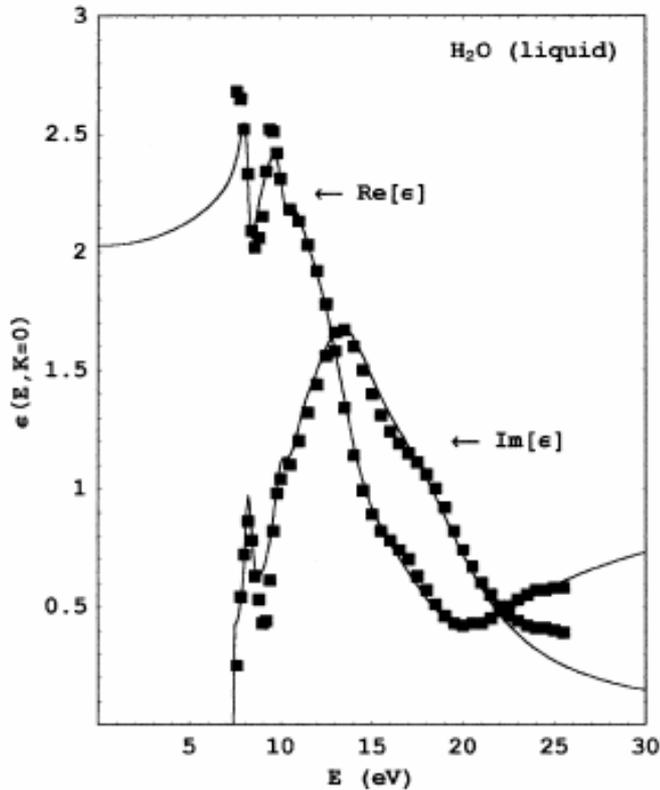
$$T = \frac{m_{e^-} \tau}{M}$$

Réponse diélectrique du milieu ou fonction de Bethe

$$\text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(E,q)} \right] = \frac{\pi}{2} \frac{E_p^2}{(q^2/2m)} \frac{1}{Z} \sum_f \left| \left\langle f \left| \sum_{j=1}^Z \exp(iqr_j/\eta) \right| i \right\rangle \right|^2$$

Exp data Hayashi et al. (J. Chem. Phys. 108 - 2001) and Heller et al. (J. Chem. Phys. 60 – 1974)

La réponse diélectrique du milieu



Modèle de **D. Emfietzoglou**
(NIMB 193 2002 71-78) comparé
aux données de **Heller et al.** (J.
Chem. Phys. 60 - 1974). **K=0**

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$$

$$\varepsilon_{2,Ioni}(E, 0) = E_P^2 \sum_j^{Ioni} f_j \frac{\gamma_j E}{(E_j^2 - E^2)^2 + (\gamma_j E)^2}$$

$$\varepsilon_{1,Ioni}(E, 0) = 1 + E_P^2 \sum_j^{Ioni} f_j \frac{E_j^2 - E^2}{(E_j^2 - E^2)^2 + (\gamma_j E)^2}$$

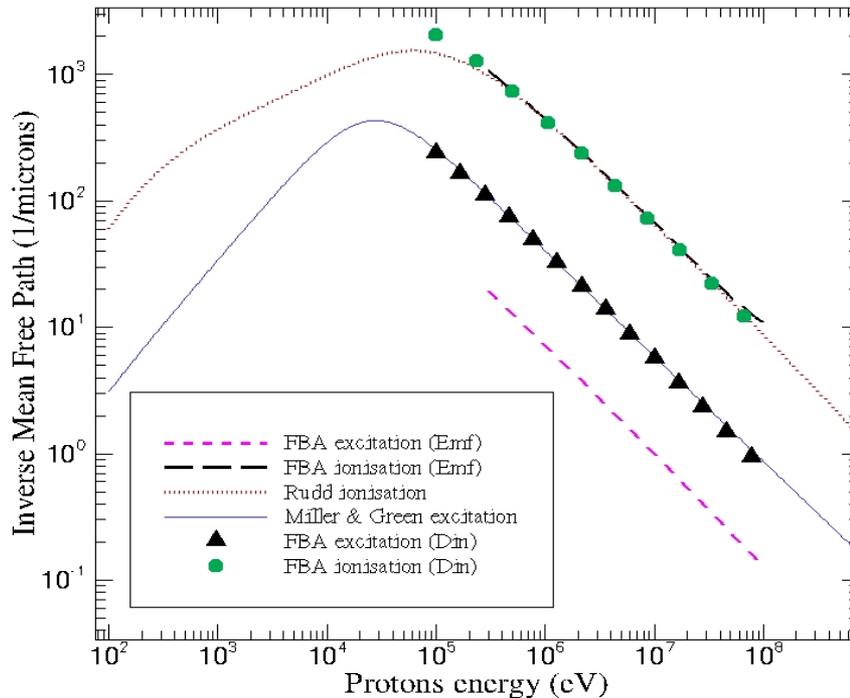
5 états discrets (correspondant aux 5
états d'**ionisation** de la molécule d'eau)
→ fit à partir de données expérimentales
et des équations de « Drude »

$$\varepsilon_{2,Exc}(E, 0) = E_P^2 \sum_j^{exc} f_j \frac{2(\gamma_j E)^3}{[(E_j^2 - E^2)^2 + (\gamma_j E)^2]^2}$$

$$\varepsilon_{1,Exc}(E, 0) = 1 + E_P^2 \sum_j^{exc} f_j \frac{(E_j^2 - E^2)[(E_j^2 - E^2)^2 + 3(\gamma_j E)^2]}{[(E_j^2 - E^2)^2 + (\gamma_j E)^2]^2}$$

5 états continus (**excitation**)

Sections efficaces des protons



- Ionisation de la couche K → modèle pour l'hydrogène de la force oscillateur généralisé

(M. Dingfelder et al. *Rad. Phys. and Chem.* 59 – 2000)

Protons $E > 500$ keV

1^{ère} approximation de Born : M. Dingfelder (PARTRAC) et D. Emfietzoglou (OREC) ajustés aux données de Heller et al.

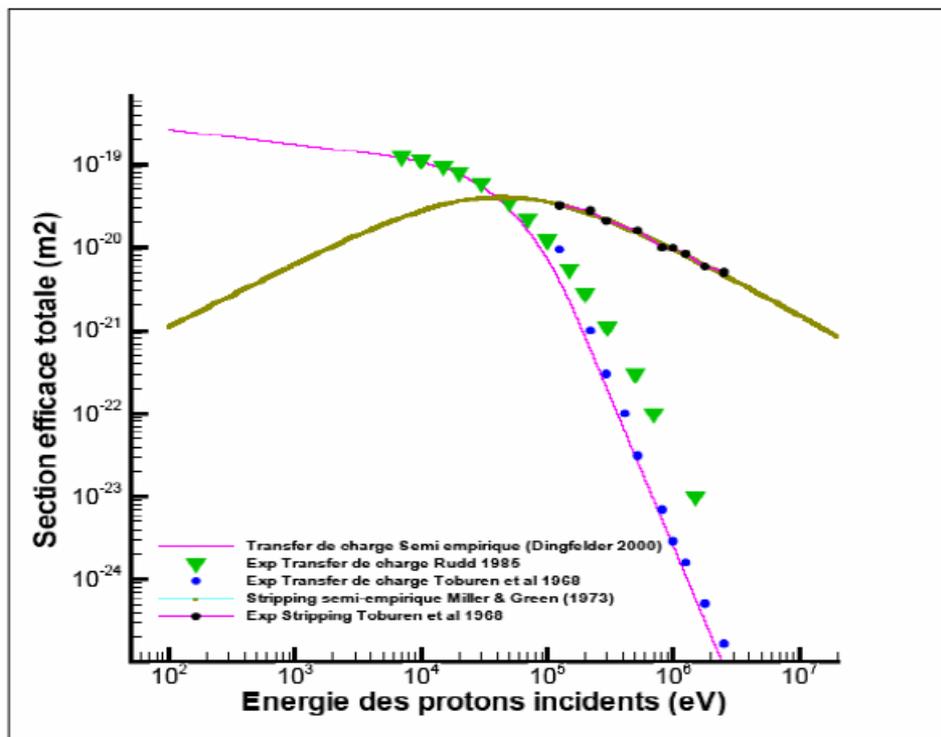
Protons $E < 500$ keV

Ionisation: modèle de Rudd et al (Rev. Mod. Phys. 64 - 1992) basé sur des données expérimentales

Excitation: Miller & Green (Rad. Res. 54-1973)

Sections efficaces de transfert de charge

- Le proton incident peut **capturer un électron** et devenir un atome d'hydrogène
- L'atome d'hydrogène peut, à son tour **perdre l'électron** et redevenir un proton « **stripping** »
- Les sections efficaces **d'ionisation de l'hydrogène** ont été modélisées, les **excitations** peuvent être négligées.



Sections efficaces de transfert de charge comparées aux données expérimentales de Toburen et Rudd

Sections efficaces de “stripping” comparées aux données de Toburen et al.

Collisions inélastiques des électrons

A haute énergie > 10 keV, Théorie de Born, mais, le terme transverse dévient important

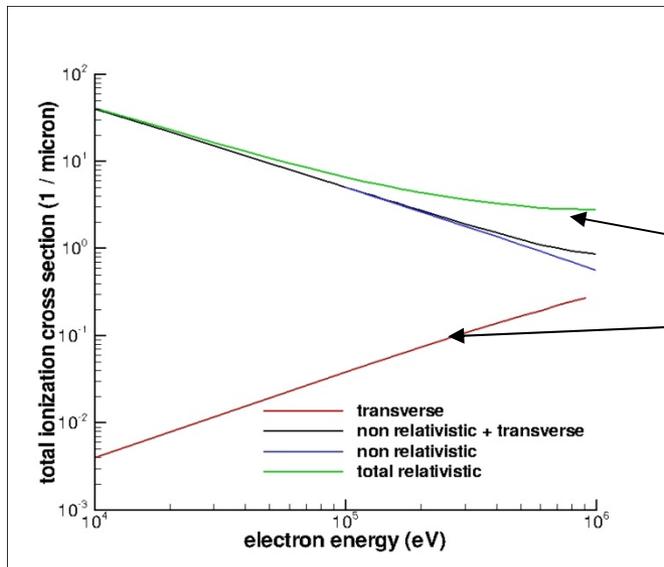
$$\Sigma_j^L = \frac{2}{\pi\alpha_0\beta^2(T)mc^2} \left\{ \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE \int_{k_{min}}^{k_{max}} \text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon(E,K)} \right]_j \frac{dK}{K} \right\}$$

Terme longitudinal

(C. Bousis et al. 2008)

$$\Sigma_j^T = \frac{1}{\pi\alpha_0\beta^2(T)mc^2} \left\{ \int_{E_{min}}^{E_{max}} \text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon(E,0)} \right]_j dE \right\} \times \left[\ln \left(\frac{1}{1-\beta^2(T)} \right) - \beta^2(T) \right]$$

Terme transverse



$$\Sigma_j = \Sigma_j^L + \Sigma_j^T$$

Collisions inélastiques des électrons

Pour des basses énergies, $E < 1 \text{ keV}$, la première approximation de Born n'est plus applicable, nous allons introduits quelques termes correctifs :

Correction de champ Coulombien : l'énergie cinétique de l'électron dévient :

$T' = T + B_j + U_j$ pour l'ionisation (avec B_j l'énergie de liaison de la couche j et U_j l'énergie cinétique de l'électrons dans la couche j)

$T' = T + 2E_j$ pour l'excitation avec E_j l'énergie d'excitation de la couche j

- Section efficace de la correction liée à la non différentiation des électrons projectile et secondaire (dérivée de la formule de Mott, Phys. Med. Biol. 48 - 2003):

$$\frac{d\Sigma_{ech}^{(j)}(W, T)}{dW} = \frac{d\Sigma^{(j)}(T - W - E_j, T)}{dW} - \left[\frac{d\Sigma^{(j)}(W, T)}{dW} \times \frac{d\Sigma^{(j)}(T - W - E_j, T)}{dW} \right]^{1/2}$$

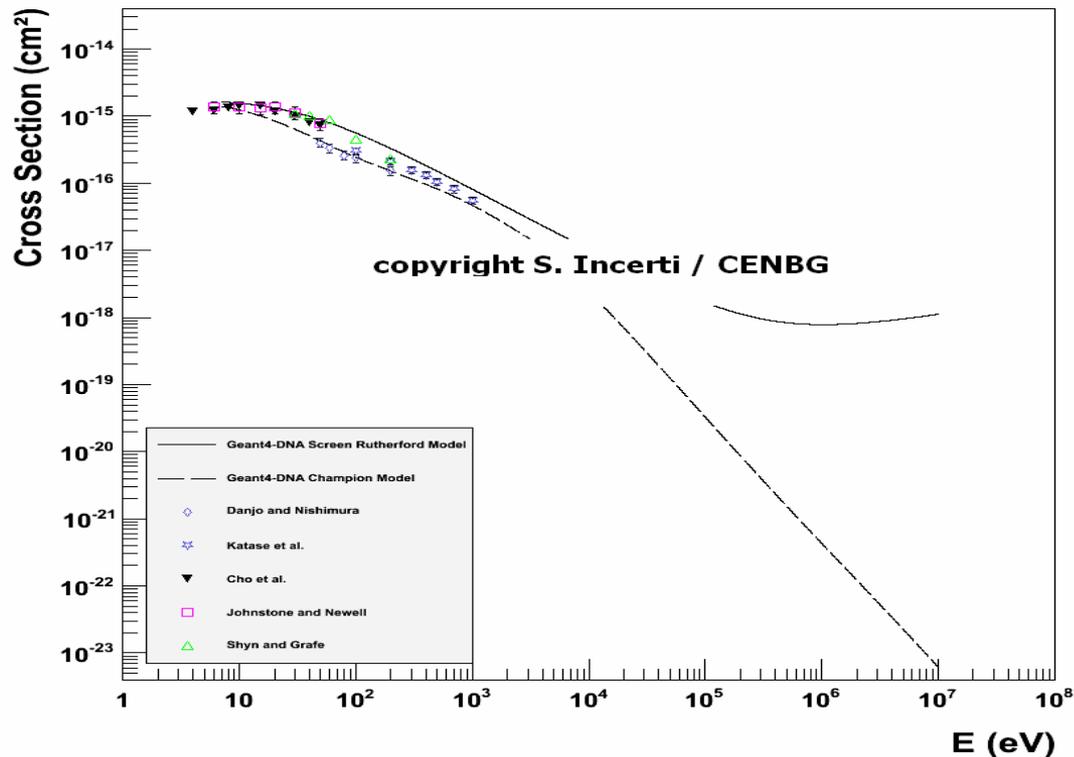
$$\frac{d\Sigma^{(j)}(W, T)}{dW} = \frac{d\Sigma^{(j)}(W, T')}{dW} + \frac{d\Sigma_{ech}^{(j)}(W, T)}{dW}$$

Les collisions élastiques des électrons

2 modèles différents peuvent être choisis:

- Modèle Screened Rutherford
- Modèle de Champion et al. (membre de la collaboration Geant4-DNA)

Electron elastic Cross Section



Données:

Danjo and Nishimura

Katase et al.

Johnstone and Newell

Shyn and Grafe

Cho et al.

En résumé, avec la nouvelle **GEANT4 (version 9.3)** on peut transporter:

Les électrons entre 8.23 eV et 1 MeV

Les protons entre 100 eV et 100 MeV

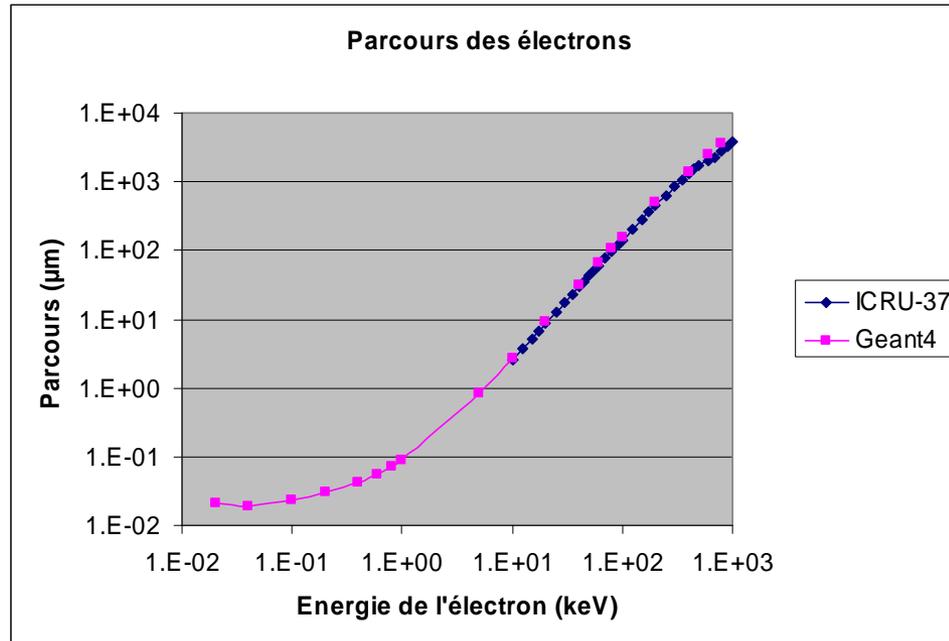
Les particules alphas entre 1 keV et 10 MeV

Les photons peuvent aussi être transportés avec les bibliothèques de Livermore (250 eV- 100 GeV) et combiner avec les processus Geant4-DNA

Version maison, prochainement disponible:

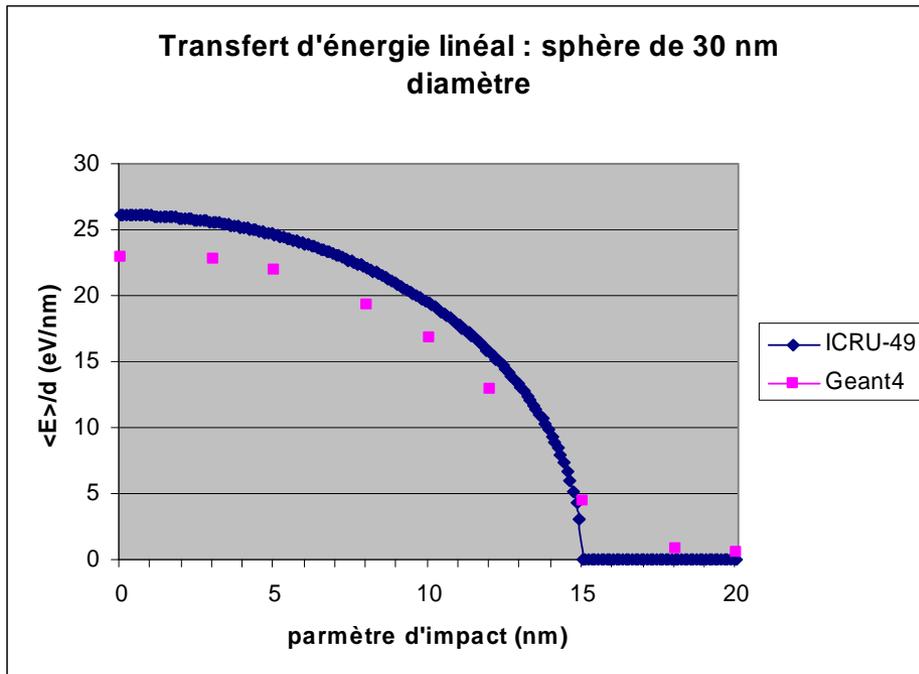
- Transport des **électrons** jusqu'à thermalisation (**0.025 eV**) à partir des données de Michaud et Sanche.
- Sections efficaces d'**attachement** entre **6 eV-13 eV** (Melton et al.)
- Transport des **ions** tels que le **C**, **Al** à partir des sections efficaces des protons et l'utilisation d'un **Z effective** (modèle de Rudd)

Quelques applications



Parcours des électrons dans l'eau liquide. Comparaison avec l'ICRU-37 qui le calcule à partir de l'intégration du pouvoir d'arrêt

Quelques applications

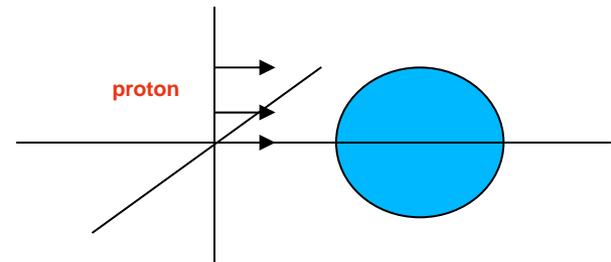


Calcul micro-dosimétrique:

Transfert d'énergie linéale

Dans une sphère de 30 nm de diamètre

B (paramètre d'impact) varie du centre de la sphère à hors de la sphère



Merci

Pour plus d'information,
visitez la page
de la collaboration Geant4-DNA

<https://twiki.cern.ch/twiki/bin/view/Geant4/LowEnergyElectromagneticPhysicsWorkingGroup>