УДК 539.172.12; 539.1.04

## МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИВЫХ БРЭГГА ДЛЯ ПРОТОНОВ, АЛЬФА-ЧАСТИЦ И ИОНОВ УГЛЕРОДА В ВОДЕ

А.В. Багуля<sup>1</sup>, В.М. Гришин<sup>1</sup>, В.А. Рябов<sup>1</sup>, И.Н. Завестовская<sup>1,2</sup>

Кривые Брэгга для протонов, альфа-частиц и ионов углерода в воде рассчитывались с помощью программного пакета GEANT4. Результаты расчетов, представляющие интерес для практического применения в протонной и ионной терапии, сравнивались с экспериментальными данными в терминах приведенных значений  $\chi^2$ . Наилучший результат был получен в рамках набора физических моделей QBBC-opt\_0, который не оптимизирован для медицинских приложений. Сделан вывод, что для улучшения точности планирования облучения пациента необходимо развитие альтернативных моделей ионизации медленных частиц в биоматериалах. Предлагается конкретная модель, развитие которой поможет решению этой задачи.

**Ключевые слова:** протонная терапия, кривая Брэгга, протон, альфа-частица, ион углерода, вода.

Введение. В ФИАН разработан протонный синхротрон для применения его в технологиях протонной лучевой терапиии социально значимых заболеваний, в том числе онкологии [1, 2]. В мировой практике для лучевой терапии кроме протонных пучков используются пучки альфа-частиц и ионов углерода. Пучки альфа-частиц и ионов углерода позволяют сузить область пика Брэгга по сравнению с протонами, локализуя область облучения пациента. Вода является основным материалом тела человека, поэтому расчеты кривых Брэгга — продольного профиля потерь энергии — для воды представляют интерес для практического дозиметрического планирования облучения пациентов.

 $<sup>^1</sup>$ ФИАН, 11999 1 Россия, Москва, Ленинский пр-<br/>т, 53; e-mail: bagulyaav@lebedev.ru. $^2$ НИЦ "Курчатовский Институт", 123<br/>182 Россия, Москва, пл. Академика Курчатова, 1.

В данной работе проведены расчеты кривых Брэгга для протонов, альфа-частиц и ионов углерода в воде в области начальных кинетических энергий порядка 100– 200 МэВ/нуклон. Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными в терминах приведенных значений  $\chi^2$ .



Рис. 1: Кривая Брэгга в воде для протонов с энергией 110 МэВ. Сплошные кривые: (a) QBBC-opt\_0, (b) QBBC-opt\_3, (b) QBBC-opt\_4. Точки – экспериментальные данные [10, 11].



Рис. 2: Кривая Брэгга в воде для альфа-частиц с энергией 150 МэВ/нуклон. Сплошные кривые: (a) QBBC-opt\_0, (b) QBBC-opt\_3, (b) QBBC-opt\_4. Точки – экспериментальные данные [12].

Моделирование кривых Брэгга в воде. Расчеты кривых Брэгга проводились в рамках программного пакета GEANT4 [3–5], версия 11.2 от декабря 2023 г. При выполнении моделирования в качестве мишени использовался водяной цилиндрический фантом длиной 300 мм, разделенный на тонкие слои перпендикулярно к направлению пучка. Для увеличения точности моделирования продольного профиля энерговыделения количе-



Рис. 3: Кривая Брэгга в воде для ионов углерода с энергией 195 МэВ/нуклон. Сплошные кривые: (a) QBBC-opt\_0, (b) QBBC-opt\_3, (b) QBBC-opt\_4. Точки – экспериментальные данные [10,13].

ство слоёв выбиралось равным 3000. Потери энергии усреднялись в каждом слое. Использовался набор физических процессов QBBC, который показал удовлетворительное согласие расчетов с данными для протонов [6]. Электромагнитная физика описывалась стандартным конструктором (opt\_0) и конструкторами (opt\_3, opt\_4), используемым в проекте GEANT4-DNA [7] (opt\_4) и в медицинских приложениях GEANT4 (opt\_3). Их различие в основном относится к описанию ионизации и многократного рассеяния электронов.

Основной вклад в потери энергии медленных заряженных частиц дают ионизационные потери. В стандартном конструкторе opt\_0 для описания ионизации материала, доступном в базе данных Haционального института по стандартам и технологиям США (NIST, National Institute of Standards and Technology) (в нашем случае – G4\_WATER) используется параметризация средних ионизационных потерь для протонов или ионов (альфа-частицы, ионы углерода), если кинетическая энергия меньше 10 МэВ [8]. Выше этой величины используется формула Бете–Блоха [9].

На рис. 1–3 показаны кривые Брэгга для протонов, альфа-частиц и ионов углерода с энергиями 110 МэВ, 150/нуклон МэВ и 195 МэВ/нуклон, соответственно. Сплошные кривые на верхней части графиков отвечают набору физических моделей QBBC-opt\_0, в середине – QBBC-opt\_3, в нижней части – QBBC-opt\_4. Экспериментальные точки для протонов [10, 11], для альфа-частиц [12] и для ионов углерода [10, 13]. Все распределения нормированы на максимум.

Таблицы 1–3 показывают значения приведенного  $\chi^2$ :  $\chi^2/N_{df}$ , где  $N_{df}$  – число степеней свободы (число экспериментальных точек в пределах обрабатываемого интервала глубины трека в воде). Интервал глубины трека протонов (70–96 мм), альфа-частиц (133–163 мм) и ионов углерода (60–85 мм) отвечал пику Брэгга, поскольку эта область обычно приходится на облучаемую опухоль.

Таблица 1

пучок	$\chi^2$	$N_{\rm nd}$	$\chi^2/N_{\rm df}$
протоны	2172.1	13	167.1
альфа-частицы	2517.7	13	193.7
ионы углерода	34.6	8	4.3

Приведенные  $\chi^2$  для кривых Брэгга (QBBC-opt\_0)

Таблица 2

пучок	$\chi^2$	$N_{\rm nd}$	$\chi^2/N_{\rm df}$
протоны	2190.4	13	168.5
альфа-частицы	2894.2	13	222.6
ионы углерода	397.5	8	49.7

Приведенные  $\chi^2$  для кривых Брэгга (QBBC-opt\_3)

## Таблица З

пучок	$\chi^2$	$N_{\rm nd}$	$\chi^2/N_{\rm df}$
протоны	2168.9	13	166.8
альфа-частицы	2954.0	13	227.2
ионы углерода	397.6	8	49.7

Приведенные  $\chi^2$  для кривых Брэгга (QBBC-opt\_4)

Обсуждение. Расчеты кривых Брэгга для протонов, альфа-частиц и ионов углерода в воде в терминах приведенного  $\chi^2$  показывают, что точность описания экспериментальных данных для альфа-частиц на уровне точности протонов, тогда как для ионов углерода точность выше точности для протонов и альфа-частиц. Это означает, что для описания геометрической модели исследуемых объектов предпочтительно использовать материалы из базы данных NIST (альфа-частицы, ионы углерода) при применении программного пакета Geant4 для планирования доз в сеансах облучения онкологических заболеваний. Использование таких материалов, как G4 BLOOD ICRP для крови человека, G4 BONE COMPACT ICRU для костей, G4 BRAIN ICRP для мозга, G4 LUNG ICRP для легких, G4 MUSCLE SKELETAL ICRP для мускулов и т.п., для описания геометрии при планировании сеансов облучения пациента означает применение NIST-параметризаций ионизационных потерь энергии ионов. Это потенциально обеспечивает более высокую точность описания кривых Брэгга альфа-частиц в биологических материалах, как показано в этой работе для воды. Однако с точки зрения статистического описания в терминах приведенного  $\chi^2$  ни одно из моделирований не обеспечило это значение порядка единицы. Наилучший результат 4.3 для ионов углерода в рамках набора физических моделей QBBC-opt 0 (стандартного конструктора, не оптимизированного для медицинских приложений) означает, что для улучшения точности планирования облучения пациента необходимо развитие альтернативных моделей ионизации медленных частиц в биоматериалах. Например, расширение в область молекулярных возбуждений интервала применимости модели фотоионизации МФИ (photo-absorption ionisation (PAI) model) [14], которая является универсальной, позволяет описывать ионизационные процессы в широких диапазонах энергии частиц и толщин материалов, причем состав материалов практически не ограничен. В этом состоит основной вывод данной работы.

Авторы благодарны В. Н. Иванченко за полезные обсуждения особенностей наборов физических моделей QBBC-opt\_0-QBBC-opt\_4 и неожиданного результата сравнительно высокой точности набора QBBC-opt\_0. Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках Соглашения № 075-15-2021-1347.

## ЛИТЕРАТУРА

- И. Н. Завестовская, А. В. Колобов, В. А. Рябов, УФН, принята к публикации. DOI: 10.3367/UFNr.2024.04.039676.
- [2] А. А. Пряничников, В. В. Сокунов, А. Е. Шемяков, Письма в ЭЧАЯ 15(7), 993 (2018). DOI: 10.1134/S1547477118070592.
- [3] S. Agostinelli, J. Allison, K. Amako, et al., Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A 506, 250 (2003). DOI:10.1016/S0168-9002(03)01368-8.
- [4] J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis, et al., IEEE Trans. Nucl. Sci. 53(1), 270 (2006).
  DOI: 10.1109/TNS.2006.869826.
- [5] J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis, et al., Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A 835, 186 (2016). DOI: 10.1016/j.nima.2016.06.125.
- [6] А. В. Багуля, М. С. Владимиров, В. Н. Иванченко, Н. И. Старков, Краткие сообщения по физике ФИАН 36(5), 3 (2009). DOI: 10.3103/S1068335609050017.
- [7] S. Incerti, G. Baldacchino, M. Bernal, et al., Int. J. Model. Simul. Sci. Comput. 1, 157 (2010). DOI: 10.1142/S1793962310000122.
- [8] https://physics.nist.gov/cgi-bin/Star/compos.pl.
- [9] https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/ PhysicsReferenceManual/html/index.html.
- [10] I. Gudowska, N. Sobolevsky, P. Andreo, et al., Phys. Med. Biol. 49, 1933 (2004). DOI: 10.1088/0031-9155/49/10/008.
- [11] U. Oelfke, G. K. Y. Lam, M. S. Atkins, Phys. Med. Biol. 41, 177 (1996). DOI: 10.1088/0031-9155/41/1/013.
- [12] J. T. Lyman, J. Howard, Int. J. Radiat. Oncol. Biol. Phys. 3, 81 (1977). DOI: 10.1016/0360-3016(77)90231-0.
- [13] M. Krämer, O. Jäkel, T. Haberer, et al., Phys. Med. Biol. 45, 3299 (2000). DOI: 10.1088/0031-9155/45/11/313.
- [14] J. Apostolakis, S. Giani, L. Urban, et al., Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A 453, 597 (2000). DOI: 10.1016/S0168-9002(00)00457-5.

Поступила в редакцию 24 июня 2024 г.

После доработки 6 июля 2024 г.

Принята к публикации 6 июля 2024 г.