とぴっくす

電子線，陽子線，炭素線の PHITS 飛跡構造解析モード

日本原子力研究開発機構
松谷 悠佑*, 甲斐 健師, 小川 達彦, 平田 悠歩, 佐藤 達彦

Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) is a general-purpose Monte Carlo code enabling radiation kinetics, which is often used in diverse research fields, such as atomic energy, engineering, medicine and science. After released in 2010, the PHITS code has been developed to expand its functions and to improve its convenience. In the few years, track-structure mode has been introduced in PHITS that can simulate each atomic interaction by electrons, positrons, protons and carbon ions in liquid water. In addition to the conventional calculation of macroscopic dose, thanks to the development of track-structure mode, the latest PHITS code enables microscopic dose calculations by decomposing it to the scale of DNA, and is expected to contribute to atomic physics, radiochemistry, and quantum beam life science. In this paper, we introduce the physical characteristics of track-structure mode in the latest version of PHITS and some examples of calculation functions using this mode.

Keywords: Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS), track-structure mode, atomic interactions, liquid water

1 はじめに

粒子・重イオン挙動解析コード PHITS（Particle and Heavy Ion Transport code System）は，任意形状の 3 次元体系内における放射線の挙動を模擬可能な国産の汎用モンテカルロ計算コード[1] であり，国立研究開発法人日本原子力研究開発機構（JAEA）が主体となり研究開発を進めている．PHITS コードは，原子力分野で重要となる低エネルギー中性子線や光子線をはじめとして，医療分野で重要となる高エネルギー陽子や重イオンなど，幅広いエネルギー範囲のさまざまな放射線の取扱いが可能である．PHITS コードは，国内外に無償提供しており，PHITS ホームページ（https://phits.jaea.go.jp/）より利用申請することで，入手可能である．最新版の PHITS バージョン 3.24 の概要や使用方法については，マニュアルやホームページを参照いただきたい．

2010 年に初版が公開されて以降，PHITS コードは機能拡張や利便性向上のために改良が進められてきた．PHITS コードは巨視的な体系における計算を得意とし，イオン線の輸送計算に電離損失モデル ATIMA（http://web-docs.gsi.de/ weick/atima/）を使用する一方，電子線の輸送計算に Electron Gamma Shower version 5（EGS5）[2] を使用してきた．これら物理モデルを考慮した粒子輸送計算は，condensed-history method に基づくため，微視的な体系における線量計算には不向きであり，放射線化学分野で重要である個々の相互作用（電離・電子的励起・解離性電子付着・分子励起）の再現は不可能であった．そこで，ナノメートルスケールの詳細な飛跡構造を解析することを目的として，放射線飛跡上の個々の相互作用の再現が可能な飛跡構造解析モードの開発が行われた．今日までに，電子線・陽電子線・陽子線・炭素線の 4 種類の荷電粒子にのみ対応している．

本解説では，最新版 PHITS（バージョン 3.24）に実装されている電子線・陽子線・炭素線の飛跡構造解析モードの概要について解説するとともに，同モードを利用した計算例を紹介する．

2 飛跡構造解析モード開発の現状

従来の PHITS 電子線輸送モードである EGS5 では，1 keV 以上を取扱い可能なエネルギーとしていた．そこで，1 keV 以下の低エネルギー電子線の挙動を再現するために，電子線専用モンテカルロコード Dynamic

Track-structure mode for electrons, protons and carbon ions in the PHITS code
Yusuke Matsuya*, Takeshi Kai, Tatsuhiko Ogawa, Yuho Hirata and Tatsuhiko Sato (*Japan Atomic Energy Agency*),
〒319–1195 茨城県那珂郡東海村白方 2–4
TEL: 029–282–6025, E-mail: matsuya.yusuke@jaea.go.jp

Monte Carlo Code（DMCC）[3–8] に使用されている衝突断面積を PHITS コードに組み込み，2018 年に電子線飛跡構造解析モード etsmode（electron track-structure mode）を開発した．

一方，従来のイオン線輸送モードは，[Delta Ray] セクション機能を使用することで，1 keV 以上の δ 線の発生のみ計算可能であった．そこで，2020 年に，世界的に有名で計算精度の高い KURBUC コードに組み込まれている陽子・炭素線の粒子輸送に係るアルゴリズム[9–11] を導入し，一次陽子線・一次炭素線周辺で発生される 1 keV 以下の二次電子の詳細な再現が可能な PHITS-KURBUC モードを開発した．

これら開発された 2 種類のモードにより，1 keV 以下の電子線輸送計算が可能となった他，弾性散乱や非弾性散乱による個々の相互作用の計算が可能となった．

2.1　電子飛跡構造解析モード

液相水中の電子飛跡構造解析モード etsmode の適用可能エネルギー範囲は，1 meV–1 MeV であり，液相水中における非弾性散乱，電離，電子的励起，解離性電子付着，振動励起，回転励起，フォノン励起の 6 種類の衝突断面積が考慮されている．電子の運動エネルギーに対するおのおのの衝突断面積を Fig. 1 にまとめる．Figure 1 に示す断面積と各物理モデルについては，水蒸気中の断面積データやアモルファス氷中のエネルギー損失率データの実測値との比較[4,12] により妥当性の確認を進めてきた．これら物理モデルの詳細については，DMCC の原著論文[3–8] やレビュー誌[13] を参照いただきたい．

この電子線飛跡構造解析モード etsmode の妥当性については，国際放射線単位測定委員会により報告される飛程の推奨値（ICRU レポート No. 37）[14] や

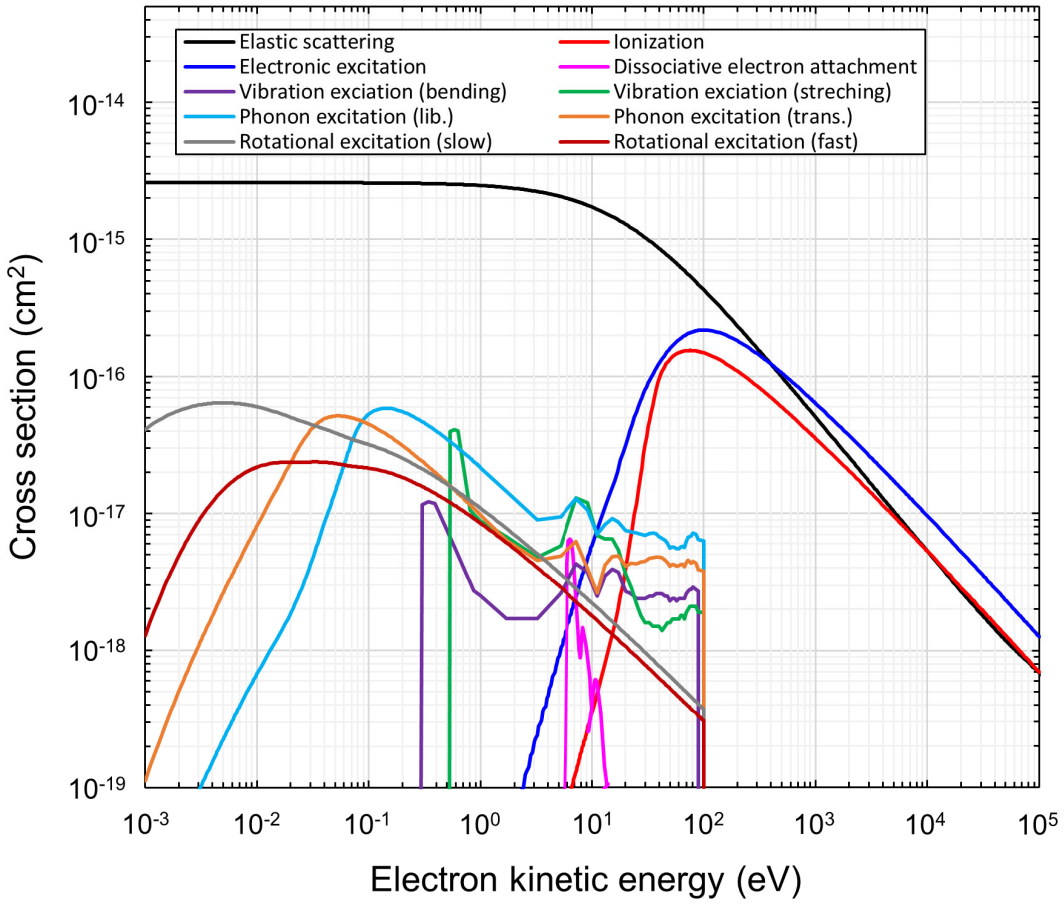

Figure 1.　Cross section of electron in liquid water.

Konovalov らの報告する実測値[15] と比較し，良好な一致を示すことがわかっている．その他に，阻止能や DNA スケールの微視的線量付与（nanodosimetry）についても他のモンテカルロコード（Geant4-DNA[16]）などと比較し，本モードの妥当性を確認してきた[17]．

これまでに多くの電子線輸送計算コード[16,18–20] が報告されてきたが，適用エネルギー範囲は 1 eV まで[16,19] であった．これに対して PHITS コードは，1 meV までの電子挙動を追跡可能であり，電子の空間分布をより高精度で模擬できる．これは，水和電子の初期生成位置に繋がると考えられるため，放射線化学分野の研究を進める際に大きなアドバンテージとなる．また，etsmode は密度スケーリングにより，液相水以外の物質中における電子輸送計算も可能となっている．

2.2　イオン飛跡構造解析モード

陽子線・炭素線の飛跡構造を解析可能な PHITS-KURBUC モードは，液相水中でのみ利用可能であり，適用可能な陽子と炭素線エネルギー範囲は，それぞれ 1 keV–300 MeV と 1 keV/n–10 MeV/n である．相互作用の種類として，弾性散乱，電離，励起過程の 3 種類に加えて，イオン線特有の電子捕獲，電子損失，二重電離も考慮されている．エネルギー損失に係る相互作用などの詳細については，KURBUC の原著論文[9–11] を参照いただきたい．このモードは，一次イオン線の電荷状態の変化と個々の相互作用を詳細に模擬できるアドバンテージを有している．KURBUC のオリジナルコードは α 線などの輸送も可能であるが，現バージョンの PHITS に考慮された KURBUC アルゴリズム

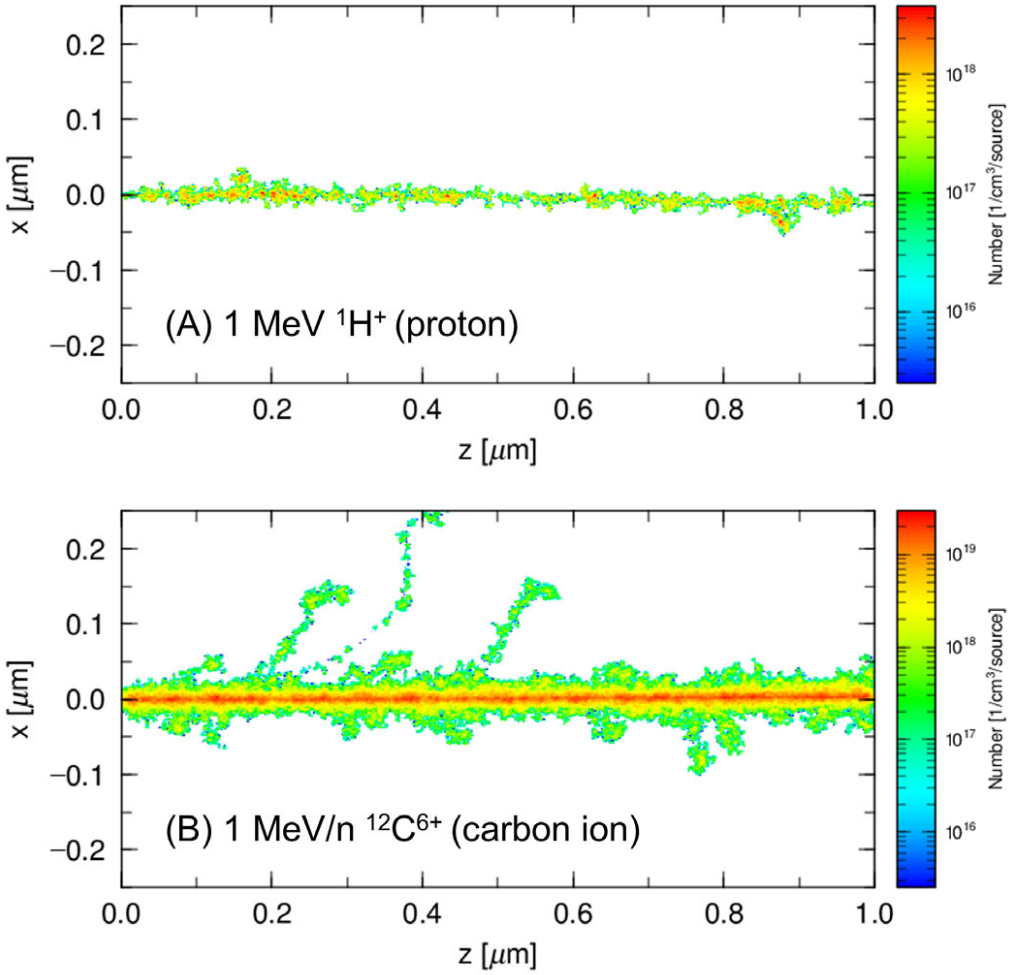

Figure 2.　Atomic interactions along a primary ion.

は陽子線と炭素線に限定されている．

Figure 2 に PHITS-KURBUC で模擬した陽子と炭素線の相互作用の空間座標を示す．Figure 2A と Fig. 2B は，1 MeV の陽子線（$^{1}H^{+}$）と 1 MeV/n の炭素線（$^{12}C^{6+}$）をそれぞれ液相水中に一本入射させた場合の相互作用の頻度分布を意味する．このように，PHITS-KURBUC モードを使用することで，一次イオン線周辺に発生する 1 keV 以下の二次電子線や個々の相互作用の出力も可能となった． 従来の ATIMA モードと PHITS-KURBUC モードにより計算される飛跡構造についても比較しており，詳細は，PHITS-KURBUC モードの原著論文[12] を参照いただきたい．PHITS-KURBUC モードの妥当性については，ICRU レポート No. 16・No. 49・No. 90 に報告される飛程の推奨値[21–23] や，Wingate らにより報告された動径線量の実測値[24] や他コードによる動径線量の計算値[25,26] などと比較し，良好な一致を確認している[12]．その他の検証として，組織比例計数管（TEPC）により測定された陽子線の微視的線量付与分布の実測値の再現にも成功している[12]．

3　飛跡構造解析モードを使用した計算例

PHITS コードは，任意の位置・時間における粒子や放射線の振る舞いをタリーと呼ばれる機能を使うことにより，容易に取得することができる．本解説で紹介する飛跡構造解析モードを使用して計算される電子線・陽子線・炭素線によるエネルギー付与，粒子フラックス，相互作用数についても，タリーを使用することで出力可能である．詳細と使用方法は，PHITS マニュアルを参照いただきたい．以下では，[t-interact] タリーを使用した相互作用数の計算例を示す．

3 次元体系に，生体内の放射線ターゲットである DNA を模擬した円柱を定義する．円柱の底面の直径を 2 nm，高さを 10 塩基対に相当する 3.4 nm とし，化

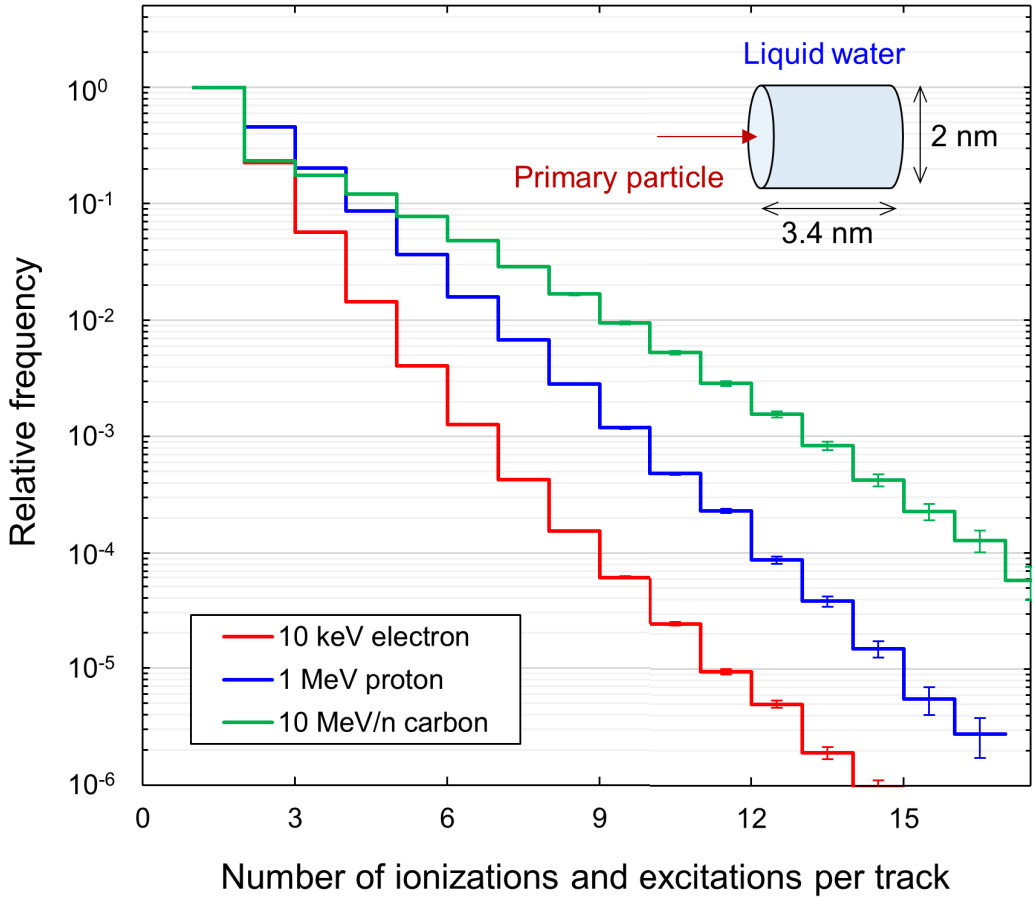

Figure 3.　Number of ionizations and excitations per radiation track calculated by the [t-interact] tally.

学組成は液相水（1 g/cm^3）とする．この水（DNA）ターゲットに，10 keV の電子，1 MeV の陽子，10 MeV/n の炭素を入射させた場合に発生する電離・励起数の相対頻度を Fig. 3 に示す．Figure 3 に示すように，飛跡構造解析モードとタリーを組み合わせることで，放射線の線質の違いに伴う入射粒子当たりの相互作用数の差を容易かつ定量的に評価可能である．

このような物理量の計算に加えて，飛跡構造解析モードを応用した計算例として，電子線照射後に生体に発生する DNA 損傷収率の解析にも成功している[17]．すなわち，飛跡構造解析モードの妥当性について，物理量（飛程・阻止能・微視的エネルギー付与）だけでなく，初期の生物応答の観点からも証明してきた．飛跡構造解析モードの導入により，PHITS コードが従来得意とする原子物理学分野のより詳細な計算の実現[27]に加え，放射線生物学分野への応用[17,28,29]も期待できる．

4　まとめと今後の展望

本解説では，放射線輸送解析コード PHITS の飛跡構造解析モードについて紹介した．本モードを活用することで，従来の PHITS では計算できない 1 keV 以下の二次電子線の輸送計算が可能になり，同時に，個々の相互作用も詳細に評価可能となった．一方で，現バージョンにおける適用可能な粒子は，電子線・陽電子線・陽子線・炭素線の 4 種に限られ，物質も主に液相水に限られている．この問題点を克服するために，現在，任意物質中において多様な粒子タイプに適用可能な汎用的飛跡構造解析モードの開発を進めている．今後，飛跡構造解析モードの拡張によって，放射線化学をはじめとするさまざまな分野への応用がより一層期待される．

〈謝　辞〉

本研究の一部は科学研究費補助金（17K07022）の援助を受けて行われました．また，共同研究者の Karolinska Institutet・Hooshang Nikjoo 教授および Chulabhorn Royal Academy・Thiansin Liamsuwan 助教授から，PHITS-KURBUC モードの開発に対してさまざまなご助言を頂きました．この場を借りて感謝申し上げます．

〈参 考 文 献〉

1) T. Sato, Y. Iwamoto, S. Hashimoto, T. Ogawa, T. Furuta, S. Abe, T. Kai, P.-E. Tsai, N. Matsuda, H. Iwase, N. Shigyo, L. Sihver, K. Niita, J. Nucl. Sci. Technol., 55 (2018) 684.
2) H. Hirayama, Y. Namito, A. F. Bielajew, S. J. Wilderman, W. R. Nelson, SLAC-R-730 and KEK Report 2005-8.
3) T. Kai, A. Yokoya, M. Ukai, K. Fujii, R. Watanabe, Radiat. Phys. Chem., 104 (2014) 16.
4) T. Kai, A. Yokoya, M. Ukai, R. Watanabe, Radiat. Phys. Chem., 108 (2015) 13.
5) T. Kai, A. Yokoya, M. Ukai, K. Fujii, R. Watanabe, Radiat. Phys. Chem., 115 (2015) 1.
6) T. Kai, A. Yokoya, M. Ukai, R. Watanabe, Int. J. Radiat. Biol., 92 (2016) 645.
7) T. Kai, A. Yokoya, M. Ukai, K. Fujii, R. Watanabe, J. Phys. Chem. A, 120 (2016) 8228.
8) T. Kai, A. Yokoya, M. Ukai, K. Fujii, T. Toigawa, R. Watanabe, Phys. Chem. Chem. Phys., 20 (2018) 2838.
9) T. Liamsuwan, S. Uehara, D. Emfietzoglou, H. Nikjoo, Int. J. Radiat. Biol., 87 (2011) 141.
10) T. Liamsuwan, H. Nikjoo, Phys. Med. Biol., 58 (2013) 641.
11) T. Liamsuwan, H. Nikjoo, Phys. Med. Biol., 58 (2013) 673.
12) Y. Matsuya, T. Kai, T. Sato, T. Liamsuwan, K. Sasaki, H. Nikjoo, Phys. Med. Biol., 66 (2021) 06NT02.
13) 甲斐 健師, 横谷 明徳, 藤井 健太郎, 渡辺 立子, 放射線化学, 101 (2016) 3.
14) ICRU Report 37, International Commission on Radiation Units and Measurements, ICRU, Bethesda, MD (1984).
15) V. V. Konovalov, A. M. Raitsimring, Y. D. Tsyetkov, Radiat. Phys. Chem., 32 (1998) 623.
16) S. Incerti, G. Baldacchino, M. Bernal, R. Capra, C. Champion, Z. Francis, S. Guatelli, P. Guèye, A. Mantero, B. Mascialino, P. Nieminen, A. Rosenfield, C. Villagrassa, C. Zacharatou, Int. J. Model. Simul. Sci. Comput., 1 (2010) 157.
17) Y. Matsuya, T. Kai, Y. Yoshii, Y. Yachi, S. Naijo, H. Date, T. Sato, J. Appl. Phys., 126 (2019) 124701.
18) W. Friedland, M. Dingfelder, P. Kundrát, P. Jacob, Mutat. Res., 711 (2011) 28.

19) H. Date, L. L. Sutherland, T. Hayashi, Y. Matsuzaki, Y. Kiyanagi, Radiat. Phys. Chem., 75 (2006) 179.
20) H. Tomita, M. Ukai, T. Kusama, A. Ito, Radiat. Environ. Biophys., 36 (1997) 105.
21) ICRU report 16, International Commission on Radiation Units and Measurements, Washington DC, U.S.A. (1970).
22) ICRU report 49, International Commission on Radiation Units and Measurements, Bethesda, Maryland, U.S.A. (1993).
23) ICRU report 90, International Commission on Radiation Units and Measurements, Oxford University Press, U.K. (2016).
24) C. L. Wingate, J. W. Baum, Radiat. Res., 65 (1976) 1.
25) G. B*ä*ckstr*ö*m, M. E. Galassi, N. Tilly, A. Ahnesj*ö*, J. M. Fernandez-Varea, Med. Phys., 40 (2013) 064101.
26) S. Incerti, M. Psaltaki, P. Gillet, Ph. Barberet, M. Bardi*è*s, M. A. Bernal, M.-C. Bordage, V. Breton, M. Davidkova, E. Delage, Z. El. Bitar, Z. Francis, S. Guatelli, A. Ivanchenko, V. Ivanchenko, M. Karamitros, S. B. Lee, L. Maigne, S. eylan, K. Murakami, P. Nieminen, H. Payno, Y. Perrot, I. Petrovic, Q. T. Pham, A. Ristic-Fira, G. Santin, T. Sasaki, H. Seznec, J. I. Shin, V. Stepan, H. N. Tran, C. Villagrasa, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B-Beam Interact. Mater. Atoms, 333 (2014) 92.
27) H. Tsuchida, T. Kai, K. Kitajima, Y. Matsuya, T. Majima, M. Saito, Eur. Phys. J. D, 74 (2020) 212.
28) Y. Matsuya, T. Nakano, T. Kai, N. Shikazono, K. Akamatsu, Y. Yoshii, T. Sato, Int. J. Mol. Sci., 21 (2020) 1701.
29) H. Nakano, D. Kawahara, S. Tanabe, S. Utsunomiya, T. Takizawa, M. Sakai, T. Nakano, A. Ohta, M. Kaidu, H. Ishikawa, BJR Open 2 (2021) 20200072.

〈著 者 略 歴〉

松谷 悠佑： 2018 年 北海道大学大学院保健科学研究院 保健科学専攻 博士後期課程修了．2018 年 日本原子力研究開発機構 博士研究員．2021 年 同機構研究員（現職）．博士（保健学）．専門：放射線生物，放射線物理，放射線生物物理，放射線治療．

甲斐 健師： 2005 年 宮崎大学大学院物質エネルギー工学専攻 博士後期課程修了．2005 年 大阪大学レーザーエネルギー学研究センター 特任研究員．2008 年 日本原子力研究開発機構 特定課題推進員．2011 年 同機構 博士研究員．2014 年 同機構 研究員．2015 年 同機構 研究副主幹．2020 年 同機構 研究主幹（現職）．博士（工学）．専門：原子分子物理，放射線物理．

小川 達彦： 2012 年 東京大学大学院工学系研究科原子力国際専攻 博士後期課程修了．2012 年 日本原子力研究開発機構 博士研究員．2015 年 同機構 研究員．2020 年 同機構 研究副主幹（現職）．博士（工学）．専門：放射線物理，原子核物理，宇宙線．

平田 悠歩： 2020 年 名古屋大学大学院工学研究科総合エネルギー工学専攻 博士後期課程修了．2020 年 日本原子力研究開発機構 博士研究員（現職）．博士（工学）．専門：放射線計測，原子力工学，量子ビーム科学，光工学．

佐藤 達彦： 2001 年 京都大学工学研究科原子核工学 博士後期課程修了．2001 年 日本原子力研究所 研究員．2005 年 日本原子力研究開発機構 研究員．2020 年 同機構 研究主席（現職）．博士（工学）．専門：宇宙線，放射線生物，放射線物理，原子核物理，放射線防護．