

Descripción mecánico-cuántica de la radiación de la materia biológica con haces de iones

- Roberto D. Rivarola,¹ M. A. Quinto,¹ J. M. Monti,¹ C. A. Tachino,¹ O. A. Fojón,¹ P. N. Terekhin,² P. F. Weck,³ M. E. Alcócer-Ávila,⁴ C. Champion⁴

¹*Instituto de Física de Rosario, CONICET-UNR*

²*Technische Universität Kaiserslautern, Alemania*

³*Sandia National Laboratories, Albuquerque, EEUU*

⁴*CELIA, Université de Bordeaux, France*

La comprensión de los mecanismos físicos que producen deposición de energía sobre la materia biológica resulta de interés principal en radioterapia, en particular en hadronterapia. La modelización de los daños radiobiológicos inducidos por las partículas ionizantes que atraviesan la materia viva requiere de un conocimiento preciso de la historia completa de la radiación. Reacciones electrónicas diferentes, como ionización electrónica, intercambio de carga y excitación, son candidatos principales para dar una descripción adecuada del proceso. Usando modelos mecánico-cuánticos, se investigan las reacciones de los blancos moleculares impactados con velocidades de colisión suficientemente altas. Entre ellos, debemos mencionar el agua, las cuatro nucleobases (adenina, citosina, timina y guanina) y el esqueleto azúcar-fosfato del ADN, como así también el uracilo del ARN. Las secciones eficaces diferenciales múltiples, simples y totales de emisión electrónica describen adecuadamente los resultados experimentales recientes. Las mediciones para captura electrónica son más escasas y es posible contrastar solamente unos pocos valores de secciones eficaces con las predicciones teóricas. Se evalúa también el rol de la emisión Auger en las reacciones de ionización y captura electrónicas. Con el objeto de obtener una mejor representación de la cartografía del depósito energético inducido por el impacto de iones sobre el medio biológico, se compara el depósito medio de energía en agua con el de un homólogo de ADN "realista". A tal efecto, se considera un blanco biológico compuesto por ADN hidratado, simulado con la incorporación de 18 moléculas de agua por nucleótido y se contrastan los resultados con el caso de ADN "seco" [1]. Una descripción detallada de transferencia de energía inducida por impacto de protones, para las reacciones de ionización y captura electrónicas, pone en evidencia discrepancias importantes entre agua y ADN, revelando también el rol crucial que juega el esqueleto azúcar-fosfato. Los resultados son incorporados en un código Monte Carlo [2,3] de transporte de partículas, para determinar los patrones de depósito de energía a escala nanométrica en el núcleo celular.

Referencias:

[1] C. Champion *et al.*, Phys. Med. Biol. **60**, 7805 (2015).

[2] M.A. Quinto *et al.*, Eur. Phys. J. D **71**, 130 (2017).

[3] M.E. Alcócer-Ávila *et al.*, Sci. Rep. Nat. Res. **9**, 14030 (2019).