3° Πανελλήνιο Συνέδριο
Ιατρικής Φυσικής

27° Διαπανεπιστημιακό Συνέδριο
Ακτινολογίας

Νανοσωματίδια Χρυσού στην Ακτινοθεραπεία: Ανάπτυξη και Αξιολόγηση Φυσικών Μοντέλων του Κώδικα Geant4-DNA

Ioannis Polopetrakis[1], Ioanna Kyriakou[1], Dousatsu Sakata[2,3,4], Hoang N. Tran[5], Vladimir N. Ivanchenko[6], Pantelis Karaiskos[7], Susanna Guatelli[3], Sebastien Incerti[5], Dimitris Emfietzoglou[1]

[1]Medical Physics Laboratory, Department of Medicine, University of Ioannina, Ioannina, 45110, Greece

[2]Division of Health Sciences, University of Osaka, Osaka, Japan

[3] Centre for Medical Radiation Physics, University of Wollongong, Wollongong, NSW, Australia

[4]School of Physics, University of Bristol, Bristol, UK

[5]Universityof Bordeaux, CNRS, LP2I Bordeaux, UMR 5797, F-33170 Gradignan, France

[6]Tomsk State University, Tomsk, Russia

[7]Medical Physics Laboratory, Medical School, National and Kapodistrian University of Athens, Athens, Greece

30, 31 ΟΚΤ + 1 ΝΟΕ
2026

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΣΧΟΛΗ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ ΥΓΕΙΑΣ
- ΤΜΗΜΑ ΙΑΤΡΙΚΗΣ, ΛΑΡΙΣΑ

Οργάνωση

ΕΦΙΕ
Ένωση Φυσικών Ιατρικής Ελλάδος

ΕΛΛΗΝΙΚΟ ΚΟΛΛΕΓΙΟ ΑΚΤΙΝΟΛΟΓΙΑΣ

Εισαγωγή

- Τα Νανοσωματίδια χρυσού (ΝΣΧ) έχουν αναδειχθεί ως πολλά υποσχόμενοι ραδιοευαισθητοποιητές για την ενίσχυση της αποτελεσματικότητας της ακτινοθεραπείας.

- Μέσω της αυξημένης παραγωγής χαμηλοενεργειακών (<1 keV) ηλεκτρονίων Auger, προκαλούν έντονη επαύξηση της απορροφούμενης δόσης στο εγγύτερο βιολογικό μέσο.

- Η ακριβής ποσοτική αποτίμηση του φαινομένου απαιτεί τη χρήση μεθόδων προσομοίωσης ικανών να περιγράψουν με υψηλή ακρίβεια τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σωματιδίων και τις διεργασίες απώλειας ενέργειας σε νανομετρική κλίμακα.

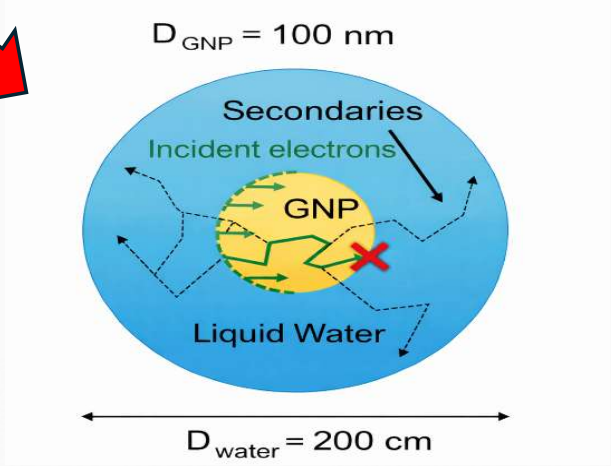
- Οι τεχνικές Monte Carlo (MC) είναι ιδιαίτερα κατάλληλες για τον σκοπό αυτό, καθώς επιτρέπουν τη στοχαστική προσομοίωση της μεταφοράς ακτινοβολίας σε σχεδόν οποιοδήποτε υλικό μέσο.

- Η προσομοίωση «δομής-τροχιάς» αποτελεί την πλέον κατάλληλη μέθοδο για τη μελέτη του εν λόγω φαινομένου, καθώς έχει τη δυνατότητα να περιγράφει τις αλληλεπιδράσεις της ακτινοβολίας με την ύλη σε κλίμακα νανομέτρων, εξασφαλίζοντας την απαιτούμενη χωρική διακριτική ικανότητα.

Μέθοδοι & Υλικά

- Έγινε χρήση της διηλεκτρικής θεωρίας ανελαστικής σκέδασης στο πλαίσιο της προσέγγισης κατά Born.
- Συμπεριλήφθηκαν τόσο χαμηλοενεργειακές διορθώσεις ανταλλαγής-συσχέτισης (exchange-correlation) όσο και κατάλληλες σχετικιστικές διορθώσεις.
- Ενσωματώθηκε αλγόριθμος διέγερσης πλασμονίων και παραγωγής χαμηλοενεργειακών ηλεκτρονίων σύμφωνα με τις ιδιότητες της συνάρτησης απώλειας ενέργειας (Energy-Loss-Function) των ΝΣΧ.
- Τα νέα δεδομένα ενσωματώθηκαν στον κώδικα Geant4-DNA μέσω της νέας κλάσης (constructor) DNA_AU_2025.
- Υπολογίσθηκε το εξερχόμενο από ΝΣΧ φάσμα δευτερευόντων ηλεκτρονίων στην επιφάνεια καθώς και ο παράγοντας επαύξησης δόσης (***DEF***).
- Σύγκριση και αξιολόγηση με τα υπόλοιπα φυσικά μοντέλα δομής-τροχιάς Geant4_DNA_AU_2016/2018, καθώς και με το μοντέλο συμπυκνωμένων ιστοριών Geant4_EmStandard_Opt4 που αποτελεί σημείο αναφοράς στην Ιατρική Φυσική.

Περιγραφή Προσομοίωσης

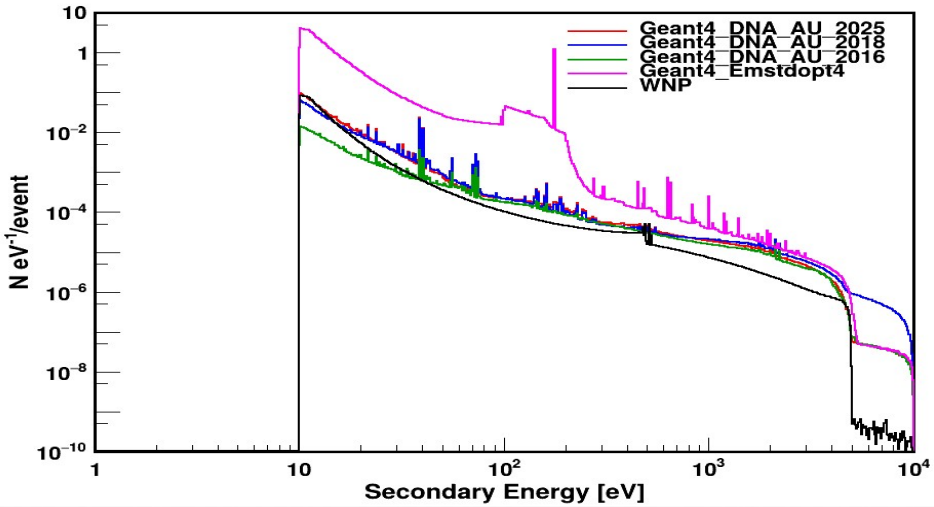


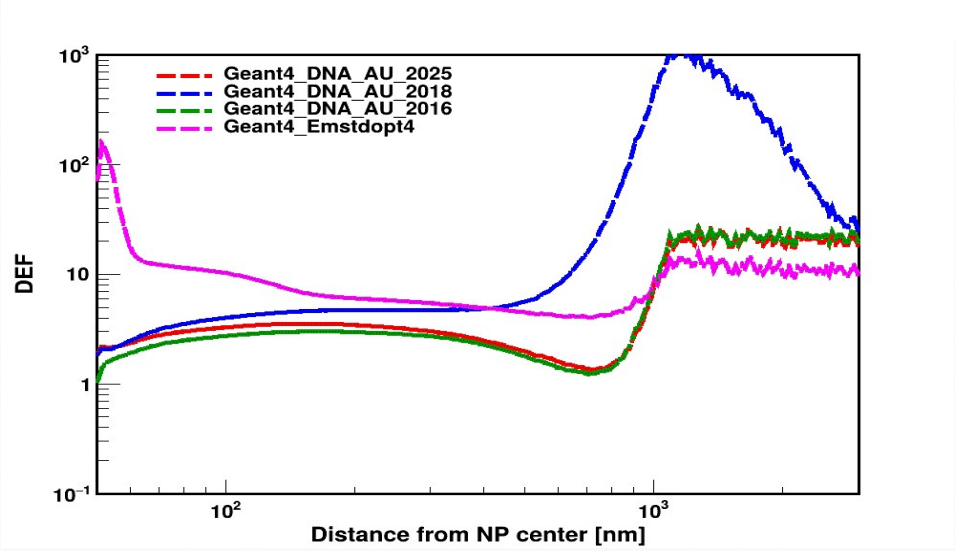
Προσπίπτοντα ηλεκτρόνια (πράσινα βέλη) ενέργειας 10 keV εκπέμπονται από το αριστερό ημισφαιρικό τμήμα της επιφάνειας ΝΣΧ. Η διάμετρος του ΝΣΧ (κίτρινο) είναι 100 nm. Τα δευτερογενή ηλεκτρόνια (μαύρα βέλη) μπορούν να διαφύγουν από το ΝΣΧ και να διαδοθούν στο περιβάλλον νερό (μπλε).

$$DEF = \frac{D_{W,with\ GNP}}{D_{W,w/oGNP}}$$

Αποτελέσματα

Δεξιά: Το φάσμα δευτερογενών ηλεκτρονίων στην επιφάνεια ΝΣΧ.





Αριστερά: Ο παράγοντας επαύξησης της δόσης (DEF) στην κοντινή περιοχή γύρω από το ΝΣΧ.

Συμπεράσματα

- Το μοντέλο DNA_AU_2016 υπο-εκτιμά το DEF έως και ~50% κοντά στην επιφάνεια του ΝΣΧ συγκριτικά με το νέο μοντέλο DNA_AU_2025.

- Σε απόσταση έως ~5 nm από την επιφάνεια του ΝΣΧ, το μοντέλο DNA_AU_2018 παρουσιάζει έως και ~5% χαμηλότερο DEF σε σύγκριση με το DNA_AU_2025. Πέρα από αυτή την περιοχή, το μοντέλο DNA_AU_2018 υπερεκτιμά έως και 60 φορές το DEF.

- Το μοντέλο συμπυκνωμένων ιστοριών Geant4_EmStandard_Opt4 υπερεκτιμά έως και 1000% τον παράγοντα ενίσχυσης σε σχέση με τα μοντέλα δομής-τροχιάς.

- Το νέο μοντέλο δομής-τροχιάς, DNA_AU_2025, αποτελεί ένα ισχυρό και αξιόπιστο πλαίσιο για προσομοιώσεις σε ΝΣΧ. Τα πρώτα αποτελέσματα αναδεικνύουν σημαντικές διαφορές από τα υπάρχοντα μοντέλα του Geant4/ Geant4-DNA στον υπολογισμό του παράγοντα επαύξησης δόσης (DEF).

Βιβλιογραφία

1. Polopetrakis I, Kyriakou I, Sakata D, Tran H N, Ivanchenko V N, Karaiskos P, Guatelli S, Incerti S and Emfietzoglou D 2025 New Geant4-DNA physics model for electron track-structure simulations in gold nanoparticles *Phys. Med. Biol.* **70** 165019

2. Sakata D, Incerti S, Bordage M C, Lampe N, Okada S, Emfietzoglou D, Kyriakou I, Murakami K, Sasaki T, Tran H, Guatelli S and Ivantchenko V N 2016 An implementation of discrete electron transport models for gold in the Geant4 simulation toolkit *J. Appl. Phys.* **120** 244901

3. Sakata D, Kyriakou I, Okada S, Tran H N, Lampe N, Guatelli S, Bordage M, Ivanchenko V, Murakami K, Sasaki T, Emfietzoglou D and Incerti S 2018 Geant4-DNA track-structure simulations for gold nanoparticles: The importance of electron discrete models in nanometer volumes *Med. Phys.* **45** 2230–42

4. Sakata D, Kyriakou I, Tran H N, Bordage M-C, Rosenfeld A, Ivanchenko V, Incerti S, Emfietzoglou D and Guatelli S 2019 Electron track structure simulations in a gold nanoparticle using Geant4-DNA *Phys. Med.* **63** 98–104

Το Ερευνητικό Έργο υλοποιήθηκε στο πλαίσιο δράσης του ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ. «Χρηματοδότηση της Βασικής Έρευνας (Οριζόντια υποστήριξη όλων των Επιστημών)» του Εθνικού Σχεδίου Ανάκαμψης και Ανθεκτικότητας «Ελλάδα 2.0» με τη χρηματοδότηση της Ευρωπαϊκής Ένωσης-NextGeneratioEU (αρ. έργου ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ.: 015283).