

Validation des modèles physiques et radiochimiques intervenant dans l'irradiation de molécules d'ADN en utilisant le logiciel GEANT4-DNA dans un environnement de grille.

T. Q. Pham^{1,2}, S. Incerti³, L. Maigne^{1,2}, Y. Perrot^{1,2} (membres de la collaboration GEANT4-ADN)

¹ Clermont Université, Université Blaise Pascal, LPC, BP 10448, F-63000 Clermont-Ferrand

² CNRS/IN2P3, UMR 653, LPC, F-63177 Aubière

³ CENBG, Centre d'Études Nucléaires de Bordeaux Gradignan, UMR5797 CNRS/IN2P3, équipe Interface Physique-Biologie. Chemin Solarium, La Haut Vigneau, BP 120, F-33175 GRADIGNAN Cedex

Introduction

La compréhension des mécanismes physiques et radiochimiques intervenant lors de l'interaction des rayonnements ionisants sur le vivant est d'un enjeu primordial pour mieux identifier les mécanismes de réparation ou d'apoptose mis en jeu à l'échelle de la cellule et de l'ADN. Le but de cette étude est de valider les modèles physiques et radiochimiques de l'outil de simulation Monte-Carlo GEANT4-DNA sur des géométries cellulaires et d'ADN. A terme, l'outil de simulation GEANT4-DNA sera intégré à la plateforme de simulation Monte-Carlo GATE v6.1 (utilisant GEANT4 9.4) développée pour les utilisateurs et chercheurs en physique médicale ; discipline regroupant l'utilisation des rayonnements ionisants en imagerie (médecine nucléaire et radiologie) et en radiothérapie.

Matériel et Méthodes

De manière à valider les modèles physiques développés dans GEANT4-DNA, nous avons calculé des points kernels de dose dans la version GEANT4 9.5 pour comparer les modèles électromagnétiques standard avec les modèles de GEANT4-DNA et le code EGSnrc, pour des électrons d'énergie comprise entre 10keV et 100keV. Les modèles physiques GEANT4-DNA ont ensuite été intégrés dans GATE v6.1. De manière à combiner dans une seule simulation, les différents modèles physiques, nous avons simulé une ligne de protonthérapie IBA (partenariat avec le National Cancer Center de Séoul en Corée) disposant d'un seul diffuseur. Pour valider la profondeur du Pic de Bragg dans l'eau liquide, nous avons comparé les mesures expérimentales avec la simulation de 30 millions de protons et les processus HadronTherapyStandardPhysics avec GATE v6.1. Les calculs ont été répartis sur l'infrastructure EGI en utilisant l'outil GateLab.

Résultats

Pour les modèles de GEANT4 DNA, le modèle de diffusion élastique de Champion reste le plus approprié pour les très basses énergies (en dessous de 10 keV). Pour les autres modèles par exemple Standard et Livermore de GEANT4, les différences observées sont dues aux modèles de diffusion multiple.

Les modèles de GEANT4-DNA sont bien intégrés et validés dans la version GATE v6.1 (utilisant GEANT4 9.4). Par simulation GATE_v6.1, nous avons calculé la profondeur du Pic de Bragg dans un fantôme d'eau liquide, ces résultats ont été comparés avec des mesures expérimentales.

Conclusion

Après l'intégration et la validation des modèles GEANT4-DNA dans GATE v6.1, des simulations combinant à la fois le modèle standard et les modèles GEANT4-DNA dans le cadre d'une irradiation d'ADN en radiothérapie sera mise en place. Les géométries d'ADN seront intégrées par fichier PDB (Protein Data Bank).