

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНДУКЦИИ ПЕРВИЧНЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ ДНК ПОСЛЕ ДЕЙСТВИЯ ТЯЖЕЛЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ПРОГРАММНОЙ СРЕДЕ GEANT4-DNA

Панина М.С., Батмунх М., Бугай А.Н.

Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория радиационной биологии,
Россия, 141890, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри 6,
Тел.: (49621) 67-197, E-mail: lyashkom@jinr.ru

Изучение первичных этапов радиационного воздействия, проявляющихся в первые доли секунды после облучения, является важной задачей современной радиобиологии, поскольку экспериментальных методов, позволяющих досконально изучить механизмы индукции первичных повреждений ДНК на столь малых временах в настоящее время не существует. Применение методов компьютерного моделирования в этой области позволяет более полно описать закономерности молекулярных взаимодействий, лежащих в основе ответа клетки на действие тяжелых зараженных частиц [1,2].

В данной работе предложена математическая модель индукции разных типов первичных повреждений ДНК (однонитевые и двунитевые разрывы, кластерные повреждения) после действия ускоренных ионов в широком диапазоне значений линейной передачи энергии (ЛПЭ).

С использованием программной среды Geant4-DNA проведено моделирование пространственной структуры треков тяжелых заряженных частиц. Рассчитаны пространственные распределения энерговыделения при действии различных тяжелых ионов на масштабе ядра клетки. С применением алгоритма DBSCAN [3] произведена количественная оценка индукции первичных повреждений ДНК в зависимости от ЛПЭ частицы. Выполнена пространственная визуализация распределения разных типов повреждений ДНК в соответствии со структурой трека частицы. Произведена оценка плотности кластеризации комплексных повреждений ДНК в зависимости от ЛПЭ частицы.

Литература.

1. Nakajima N. I. et al. Visualisation of γ H2AX foci caused by heavy ion particle traversal; distinction between core track versus non-track damage // *PloS one*. 2013, T. 8(8), С. e70107.
2. Watanabe R., Rahmanian S., Nikjoo H. Spectrum of radiation-induced clustered non-DSB damage – A Monte Carlo track structure modeling and calculations // *Radiation research*. 2015, T. 183(5), С. 525-540.
3. Francis Z., Villagrasa C., Clairand I. Simulation of DNA damage clustering after proton irradiation using an adapted DBSCAN algorithm // *Computer methods and programs in biomedicine*. 2011, V. 101(3), P. 265-270.