

BADANIA AB INITIO DYNAMIKI ELEKTRONOWEJ POD WPŁYWEM IRRADIACJI SZYBKIMI JONAMI

Streszczenie popularnonaukowe

Radioterapia jest jedną z podstawowych metod leczenia różnych rodzajów nowotworów i stanowi terapię pierwszego rzutu dla wielu pacjentów. Działanie radioterapii opiera się na dostarczeniu dawki promieniowania jonizującego w miejsce, gdzie zlokalizowany jest nowotwór. To promieniowanie uszkadza DNA dotkniętych komórek, prowadząc do ich śmierci i pozytywnych efektów terapeutycznych. Tradycyjnie w terapii radiacyjnej używa się wysokoenergetycznych fotonów (rentgenowskich) jako promieniowania jonizującego. Jednak od początku XXI wieku coraz częściej stosuje się terapię protonową (protonoterapię). W tym podejściu używana jest wiązka wysokoenergetycznych protonów do celowania w komórki nowotworowe zamiast promieni X. Główne różnice między terapią radiacyjną opartą na protonach a terapią opartą na fotonach wynikają z ich odmiennych profili depozycji energii w tkance. Wiazka fotonów traci energię w niemal eksponencjalnym tempie w miarę przenikania przez tkankę. W konsekwencji, aby dotrzeć do głębiej położonej tkanki nowotworowej, wymagana jest wyższa początkowa dawka promieniowania lub użycie wielu kątów naświetlania, co może uszkodzić otaczające zdrowe komórki. W przeciwieństwie do tego, wiązki protonów (i innych ciężkich jonów) mają inny profil depozycji energii. Protony początkowo tracą energię w wolnym, stałym tempie, dostarczając mniejszą dawkę promieniowania do powierzchownych tkanek. Gdy osiągną swoją charakterystyczną głębokość penetracji, protony gwałtownie zwalniają i przekazują większość swojej dawki promieniowania w małym, skoncentrowanym obszarze znanym jako szczyt Bragga. Lokalizacja szczytu Bragga zależy od początkowej prędkości protonów i może być dostosowywana w celu minimalizacji uszkodzeń otaczającej zdrowej tkanki oraz dostosowania wiązki protonów dla każdego pacjenta na podstawie rodzaju i składu dotkniętej tkanki.

Niniejszy projekt badawczy dotyczy teoretycznego opisu oddziaływań proton-materia dla prędkości protonów najbardziej istotnych dla terapii radiacyjnej, tj. w obszarze szczytu Bragga, który odpowiada maksymalnej szybkości utraty energii protonów (zdolności hamowania) podczas ich przechodzenia przez materię. W tym obszarze dostępne narzędzia teoretyczne są nieadekwatne lub stają się nieakceptowalnie kosztowne obliczeniowo. Jednym z głównych celów projektu jest opracowanie i implementacja metod teoretycznych, które umożliwią badanie dynamiki elektronów wywołanej przez wiązkę protonów o wysokiej energii na attosekundowej skali czasowej. Metody te zostaną następnie zastosowane do (i) obliczenia zdolności hamowania wody z pierwszych zasad tj. bez odwoływania się do danych eksperymentalnych oraz (ii) badania mechanizmów aktywacji substancji fotouczulających w terapii protono-dynamicznej. Warto jednak zaznaczyć, że modele teoretyczne opracowane w projekcie nie ograniczają się w swoim zastosowaniu do wspomnianych zagadnień związanych z protonoterapią i mogą być użyte w innych dziedzinach badań, takich jak fizyka ultraszybkich procesów (attosekundowych) czy spektroskopia molekularna.