محاسبهٔ آسیب ناشی از رادیونوکلئید 125I در فواصل مختلف از محور مرکزی DNA بر اساس مدل اتمی و با استفاده از جعبه‌ابزار Geant4-DNA

پروین احمدی[۱]، مجتبی شمسایی زفرقندی*[۲]، علی‌اصغر شکری[۱]

۱) گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

۲) دانشکدهٔ مهندسی انرژی و فیزیک، دانشگاه امیرکبیر، تهران، ایران

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۳/۲۶ تاریخ پذیرش:۱۳۹۹/۸/۲۶

چکیده

مقدمه: این مطالعه روشی برای بررسی آسیب‌های ناشی از تابش رادیونوکلئید گسیلندهٔ اوژه است.

مواد و روش‌ها: در این مطالعه، بهرهٔ شکست ناشی از رادیونوکلئید ید در فواصل مختلف از مرکز DNA، با به‌کارگیری ابزار Geant4-DNA و با استفاده از مدل اتمی ارزیابی شد.

یافته‌های پژوهش: میانگین بهرهٔ شکست در DNA، به‌عنوان تابعی از فاصله از مرکز محور DNA تا مکان واپاشی رادیونوکلئید گسیلندهٔ اوژه نشان داده‌شده است.

بحث و نتیجه‌گیری: این تحقیق نشان می‌دهد بیشترین آسیب توسط الکترون کم‌انرژی زیر ۱ کیلو الکترون‌ولت و به‌ویژه هنگامی‌که در نزدیکی DNA قرار می‌گیرند، دیده می‌شود.

واژه‌های کلیدی: Geant4-DNA، الکترون اوژه، هسته‌های پرتوزا، شکست دوگانه

* نویسنده مسئول: دانشکدهٔ مهندسی انرژی و فیزیک، دانشگاه امیرکبیر، تهران، ایران

Email: pysham@aut.ac.ir

Copyright © 2019 Journal of Ilam University of Medical Science. This is an open-access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution international 4.0 International License (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/) which permits copy and redistribute the material, in any medium or format, provided the original work is properly cited.

[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-11]

[DOI: 10.29252/sjimu.28.5.103]

مقدمه

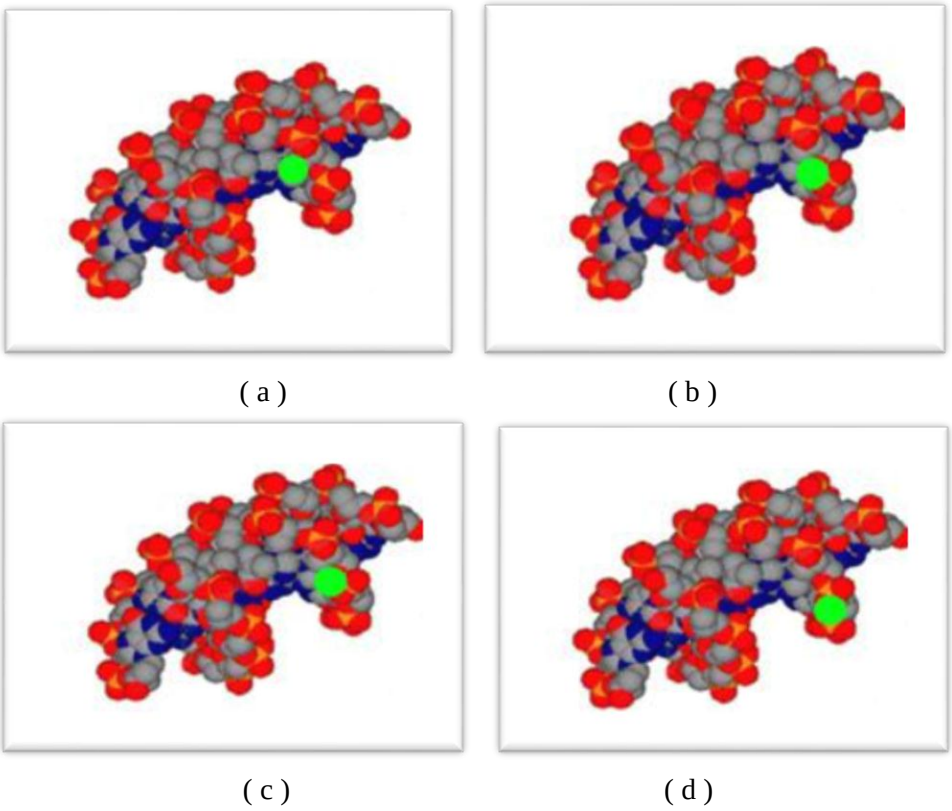
هدف درمانی با رادیونوکلئیدهای اوژه، به علت برد کوتاه در حد ابعاد سلولی و LET بالا و رساندن سمیت بالا به تومور و سلول‌های سرطانی توجه شده است. هنگامی‌که رادیونوکلئیدهای گسیلندهٔ اوژه در سلول‌های سرطانی قرار می‌گیرند، سبب آسیب به DNA می‌شوند و می‌توانند سرعت رشد سلول‌های سرطانی را کنترل کنند (۱). این اثر با تأثیر مستقیم تابش‌های یونیزان بر روی سلول ایجاد می‌شود؛ همچنین به علت اینکه بخش فراوانی از سلول، از آب تشکیل‌شده است، ممکن است هنگام تعامل تابش با آب، رادیکال‌های آزاد تولید شوند که این یک اثر غیرمستقیم به‌شمار می‌آید . تأثیر تابش می‌تواند سبب شکست‌های دوگانه در DNA شود. رادیونوکلئیدهای گسیلندهٔ اوژه، به‌ویژه در درمان سرطان‌های از نوع متاستاز و یا تومورهای کوچک کاربرد دارند. 125I شناخته‌شده‌ترین عضو خانوادهٔ رادیونوکلئیدها است که از آن‌ها به‌عنوان گسیلندهٔ اوژه یاد می‌شود. به علت سمیت بسیار و برد کوتاه و تابش حداقل به بافت سالم، این نوع رادیونوکلئید به نامزد مناسبی برای درمان سرطان تبدیل شده است. واپاشی این رادیونوکلئیدها، با انتشار چندین الکترون کم‌انرژی در محل واپاشی، به‌ویژه هنگامی‌که در نزدیکی DNA قرار می‌گیرند، سبب نابودی سلول می‌شوند. درصورتی‌که رادیونوکلئید استفاده‌شده در درون سلول قرار گیرد، یک مولکول حامل باید رادیونوکلئید را از غشای سلول عبور دهد. این فرایند به روش نشان‌دارسازی یا عمل سنتز صورت می‌گیرد که در آن، هدایت رادیونوکلئید به سوی کروموزوم‌ها انجام می‌شود. انرژی انباشتی حاصل از واپاشی در مجاورت کروموزوم‌ها، سبب ایجاد شکست در پیوند میان مولکول‌های کروموزوم می‌شود.

در این مطالعه، موقعیت ید در چهار سنتز با نام‌های m-Iodo-p-ethoxyHoechst (125IE-H)، m-Iodo-p-methoxyHoechst (125IM-H)، 4-iodophenyl methanamineHoechst (C8 linker) (125IC8-H) و 5-125I iodo-2-deoxyuridine، در شکل شمارهٔ ۱ شبیه‌سازی شد و شکست دوگانهٔ آن‌ها در فواصل گوناگون از محور کروموزوم بررسی گردید.

آسیب‌های ناشی از تابش، با استفاده از روش‌های نظری و تجربی بررسی شده (۲–۸)؛ اما بسیاری از جنبه‌های کمی آسیب ناشی از تابش، هنوز به‌طور کامل توسط روش‌های تجربی بررسی نشده است. در این زمان، شبیه‌سازی به درک بعضی از جزئیات آثار تابش‌های یونیزان در مقیاس‌های سلولی و درون‌سلولی کمک می‌کند. کدهای مونت‌کارلوی متداول در شبیه‌سازی (۹،۱۰) ARTRAC، (۱۱) PITS، (۱۲) TRAX، (۱۳) RITRACKS، (۱۴) KURBUC و (۱۵) Geant4 هستند. Geant4 کدی با دسترسی آزاد است که شامل کلاس‌های کتابخانه‌ای به زبان C++ است و امکان شبیه‌سازی برهم‌کنش ذرات در مقیاس نانو و زیرسلولی را در محیط آب مایع فراهم می‌کند. از Geant4-DNA که در سال ۲۰۰۸ از Geant4 استخراج‌شده، در این پژوهش برای شبیه‌سازی آسیب تابش یونیزان در مقیاس DNA استفاده‌شده است. این کد توانسته است فعل و انفعالات ذرات با آب مایع در انرژی‌های چند الکترون‌ولت تا چند مگا الکترون‌ولت را شبیه‌سازی کند (۱۶–۲۲).

[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-11]

[DOI: 10.29252/sjimu.28.5.103]



شکل شمارهٔ ۱. فاصلهٔ اتم ید (کرهٔ سبز رنگ) به ترتیب در (a) ۰/۵۷، (b)۰/۸۶۱، (c)۰/۹۲ و (d) ۱/۳۹ نانومتر از مرکز محور DNA.

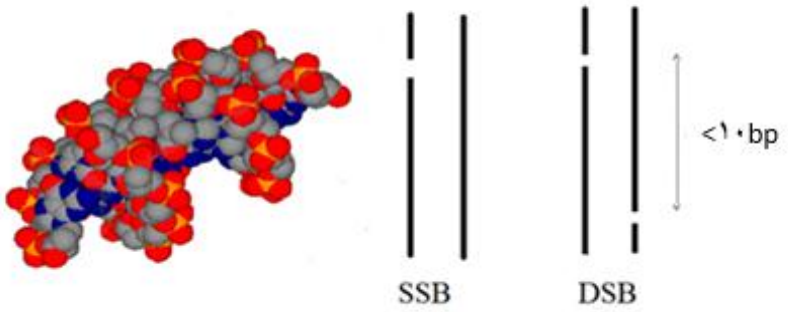
مواد و روش‌ها

Geant4 نرم‌افزاری مبتنی بر روش مونت‌کارلو است. این کد، کدی با هدف کلی است و به‌طور گسترده، در زمینه‌های گوناگونی ازجمله فیزیک انرژی بالا، مطالعات فضایی، پزشکی و رادیوبیولوژیک به‌کار می‌رود. این کد تعداد بسیاری کتابخانه دارد و کاربر به منبع داده، دسترسی باز دارد. Geant4 شامل مجموعه اولیهٔ فرایندهای فیزیکی در آب تا محدودهٔ انرژی پایین است. Geant4-DNA که از Geant4 استخراج‌شده است، اجازه می‌دهد تا تعامل ذرات با انرژی پایین در مقیاس نانومتر را توصیف کند. این کد برای دزیمتری و نانودزیمتری مناسب است و نرم‌افزاری مبتنی بر زبان برنامه‌نویسی C++ است که می‌تواند تعامل ذرات با ماده را در طیف گسترده‌ای از انرژی، هندسه و ابعاد شبیه‌سازی کند (۲۱، ۱۵). در این کد، از آب مایع برای فعل و انفعالات ذرات استفاده‌شده است که یک تخمین منطقی از فرایندهای بیولوژیکی است. در این کار، از مدل اتمی B-DNA استفاده‌شده است. B-DNA محتمل‌ترین ساختار DNA در سلول‌های زنده است (۲۰). بسیاری از پژوهش‌ها توانایی Geant4-DNA را با بستهٔ الکترومغناطیسی کم‌انرژی برای شبیه‌سازی تابش در مقیاس‌های سلولی و درون‌سلولی نشان داده‌اند (۲۴، ۲۳، ۱۹، ۱۸). در این مطالعه، از طیف 125I استفاده شد که در گزارش AAPM آمده است (جدول شمارهٔ ۱) (۲۵). در مطالعهٔ شبیه‌سازی، از ۱۰۰۰۰۰۰ الکترون به‌عنوان منبع ذرات باردار اولیه بهره گرفته شد. الکترون‌ها به‌طور تصادفی تولید می‌شوند . مدل bna.pdb1 از بانک دادهٔ پروتئین (PDB lib) استخراج‌شده است. آسیب DNA ناشی از تابش یونیزان مستقیم و غیرمستقیم بررسی گردید. برای اثر مستقیم، انرژی آستانه (حداقل مقدار انرژی لازم برای ایجاد شکست در هر رشته DNA) ۱۰/۷۹ الکترون‌ولت است. که این ۱۰/۷۹ الکترون‌ولت، کمترین انرژی یونیزاسیون آب در کد Geant4-DNA است. برای تخمین اثر غیرمستقیم DNA، روش پامپون کاربرد دارد. در روش پامپون، از یک روش در بررسی اثر مستقیم و غیرمستقیم

[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-11]

[DOI: 10.29252/sjimu.28.5.103]

استفاده‌شده است و تفاوت در اثر مستقیم و غیرمستقیم، تفاوت در انرژی آستانهٔ آن‌هاست. برای تأثیر مستقیم انرژی آستانه، ۱۰/۷۹ الکترون‌ولت و برای اثر غیرمستقیم، ۱۷ الکترون‌ولت (به‌عنوان حداقل انرژی لازم برای تولید یک جفت رادیکال) استفاده‌شده است (۲۷-۲۶). هنگامی‌که انرژی برجاگذاشته در گروه‌های قند ـ فسفات برابر یا بیشتر از انرژی آستانه باشد، یک شکست تک‌رشته‌ای اتفاق می‌افتد. هنگامی‌که دو شکست تک‌رشته‌ای در دو رشتهٔ متضاد و در فاصلهٔ کمتر از ۱۰ جفت باز اتفاق بیفتد، یک شکست دوگانه شکل می‌گیرد (شکل شمارهٔ ۲) (۲۸، ۴، ۳).



شکل شمارهٔ ۲. شکست تک‌رشته‌ای و شکست دوگانه (راست)؛ ساختار مولکولی (DNA bna.pdb1) (چپ)

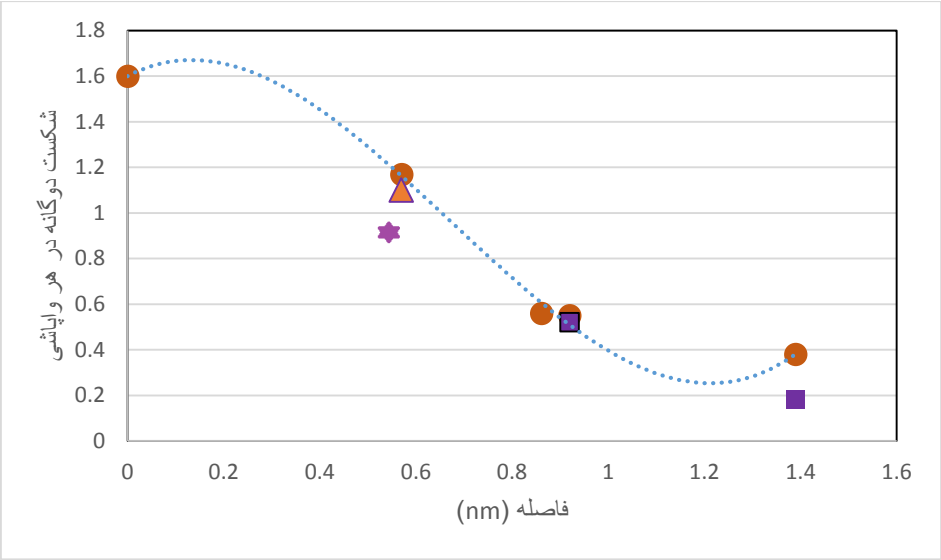
از آنجا ۷۰ درصد سلول‌ها از آب تشکیل‌شده است، هنگامی‌که سلول در معرض تابش یونیزان قرار می‌گیرد، انرژی تابش بیشتری توسط مولکول‌های آب جذب می‌شود و سبب ایجاد رادیکال‌های آزاد می‌گردد. این تأثیرات به‌عنوان آثار غیرمستقیم تابش یونیزان شناخته می‌شوند. در مرحلهٔ شیمیایی، در میان گونه‌های شیمیایی OH، e_{aq}، O_2، H_2، H تولیدشده ، OH بیشترین توانایی تعامل با DNA را دارد. رادیکال‌های هیدروکسیل بسیار بیشتر از سایر گونه‌ها، با قند و گروه‌های پایه در DNA واکنش برقرار می‌کنند. احتمال تعامل رادیکال OH با قند فسفات، ۲۰ درصد و پایه، ۸۰ درصد است. احتمال آسیب و یا شکست تک‌رشته‌ای ناشی از تعامل OH با قند فسفات، ۱۳ درصد است. احتمال آسیب ناشی از اثر غیرمستقیم، با احتمال ۱۳ درصد به‌دست‌آمده است (۴).

یافته‌های پژوهش

در این کار، برای بررسی واپاشی 125I، از Geant4-DNA برای پیش‌بینی شکست DNA استفاده‌شده است. نتایج شکست دوگانه در هر واپاشی ناشی از 125I، در فواصل گوناگون از محور مرکزی DNA در شکل شمارهٔ ۳ نشان داده‌شده است. این تحقیق نشان می‌دهد که شکست دوگانه در هر واپاشی، به ترتیب ۱/۶، ۱/۱۷ ، ۰/۵۶ ، ۰/۵۵ و ۰/۳۸ برای 125I در فواصل صفر، ۰/۵۲، ۰/۸۶۱، ۰/۹۲ و ۱/۳۹ از مرکز محور DNA است. نتایج حاصل از شبیه‌سازی حاضر در جدول شمارهٔ ۲ خلاصه‌شده است.

[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-11]

[DOI: 10.29252/sjimu.28.5.103]



شکل شمارهٔ ۳. ■میانگین تعداد شکست‌های دوگانه به‌ازای هر واپاشی 125I، بر حسب فاصله از محور مرکزی مولکول DNA در فواصل صفر، ۰/۵۷، ۰/۸۶۱، ۰/۹۲ و ۱/۳۹ نانومتر. ✽ مدل حجمی Raisali . ⬢ مدل Humm. ♥ روش تجربی Balagurumoorthy.

جدول شمارهٔ ۱. طیف الکترون‌های اوژه 125I (۲۵)

125I		
فرایند	انرژی (keV)	بازده
CK NNX	۰/۰۲۹۹	۳/۵۱
Auger NXY	۰/۰۳۲۴	۱۰/۹
CK MMX	۰/۱۲۷	۱/۴۴
CK LLX	۰/۲۱۹	۰/۲۶۴
Auger MXY	۰/۴۶۱	۳/۲۸
Auger LMM	۳/۰۵	۱/۲۵
Auger LMX	۳/۶۷	۰/۳۴۰
Auger LXY	۴/۳۴	۰/۰۲۱۱
Auger KLL	۲۲/۴	۰/۱۳۸
Auger KLX	۲۶/۴	۰/۰۵۹
KXY Auger	۳۰/۲	۰/۰۰۶۵

جدول شمارهٔ ۲. میانگین تعداد شکست‌های دوگانهٔ الکترون‌های اوژه در فواصل گوناگون از محور اصلی DNA با استفاده از مدل اتمی

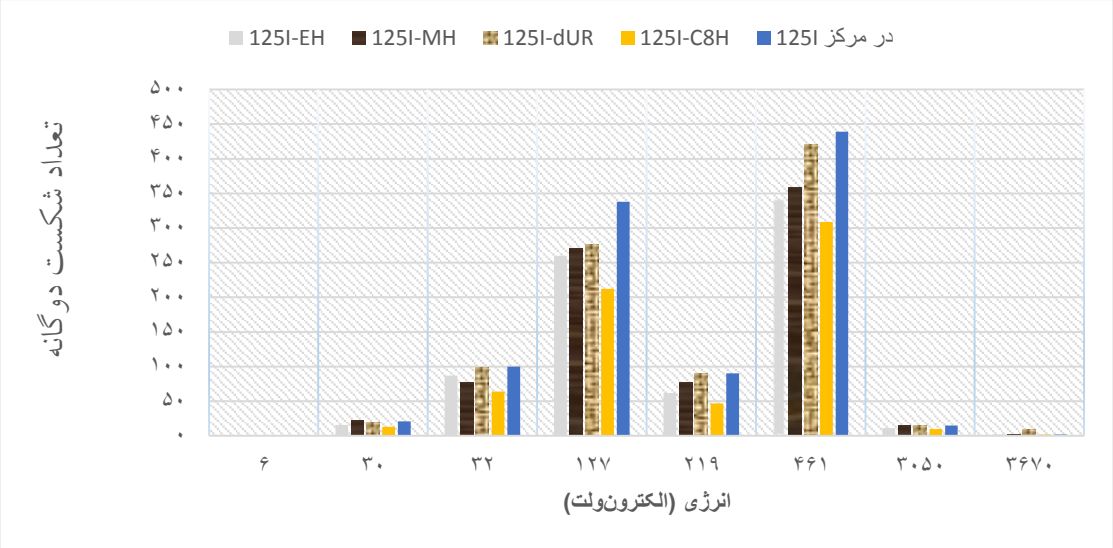
نام سنتز 125I	فاصلهٔ 125I از مرکز DNA(nm)	میانگین تعداد شکست دوگانه در هر واپاشی 125I در این مطالعه	میانگین تعداد شکست دوگانه در هر واپاشی 125I دیگر کارها (مرجع)
125IMH	۰/۸۶۱	۰/۵۶	–
125IEH	۰/۹۲	۰/۵۵	۰/۵۲ (۲)
125IC8H	۱/۳۹	۰/۳۸	۰/۱۸ (۲)
125IdUr	۰/۵۷	۱/۱۷	۱/۱ (۲۹)
			۰/۹۸ (۳۰)
--	صفر	۱/۶	–

با افزایش فاصلهٔ 125I از محور مرکزی DNA، از ۰/۵۷ نانومتر به ۱/۳۹ نانومتر، شکست دوگانه در هر واپاشی به ترتیب با حدود ۲۶/۸ و ۷۶/۲۵ درصد کاهش می‌یابد. در اصل، شکست دوگانه در هر واپاشی رادیونوکلئید گسیلندهٔ الکترون اوژه، با افزایش فاصله میان رادیونوکلئید ید و DNA کاهش می‌یابد. بیشترین

[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-11]

[DOI: 10.29252/sjimu.28.5.103]

شکست دوگانه در الکترون‌های اوژه زیر ۱ کیلو الکترون‌ولت اتفاق می‌افتد (شکل شمارهٔ ۴). نتایج نشان‌دهندهٔ افت سریع در بهرهٔ شکست دوگانه، با افزایش فاصله از محور مرکزی DNA است.



شکل شمارهٔ ۴. میانگین تعداد شکست دوگانه الکترون‌های اوژه در انرژی‌های گوناگون با استفاده از مدل اتمی

بحث و نتیجه‌گیری

مطالعهٔ حاضر نشان‌دهندهٔ جزئیات بیشتر بررسی الکترون اوژه و آثار بیولوژیکی مستقیم و غیرمستقیم رادیونوکلئید 125Iاست. در این پژوهش از Geant4-DNA (pdb4dna) استفاده گردید و از مدل PDB و ساختار B-DNA بهره گرفته شد که شبیه‌ترین ساختار به DNA انسان است. در این ساختار، محل قرار گرفتن اتم‌ها در ساختار DNA کاملاً شبیه‌سازی‌شده است. تأثیر اتم‌های رادیونوکلئید در فواصل گوناگون از محور، برای تولید آسیب‌های مستقیم و غیرمستقیم بررسی‌شده است. این مطالعه نشان می‌دهد میان شکست دوگانه در هر واپاشی و فاصلهٔ منبع از مرکز DNA، رابطهٔ نمایی وجود دارد و کاهش حدود ۸۰ درصد بهرهٔ شکست در فاصلهٔ ۱/۱ نانومتر رخ می‌دهد. این موضوع نشان می‌دهد که آسیبDNA در فواصل دور از محور، به علت برد کوتاه الکترون‌های اوژه، به‌شدت کاهش می‌یابد و پس از این فاصله، شمارش کم شکست مربوط به آثار غیرمستقیم تابش است و در خارج از سلول رادیونوکلئید گسیلندهٔ اوژه، در عمل تأثیری در ایجاد شکست ندارد. بیشترین آسیب دربارهٔ الکترون‌های اوژه و کاستر کرونینگ با انرژی زیر ۱ کیلو الکترون‌ولت و مربوط به لایه‌های M و N و در مجاورت DNA رخ می‌دهد. 125I با داشتن الکترون‌های تابشی زیر ۴ keV و با بازدهٔ نسبتاً خوب در این محدودهٔ انرژی و ویژگی‌های شیمیایی مناسب برای نشان‌دار کردن، گزینهٔ شایسته‌ای برای هدف درمانی است. با توجه به انرژی برجا گذاشتهٔ این گسیلنده در فواصل چند نانومتر و هدایت هدفمند آن به نزدیکی کروموزوم، زمینهٔ انهدام و کنترل توده‌های سرطانی را فراهم خواهد کرد. برای طراحی بهتر استراتژی‌های هدف درمانی مبتنی بر الکترون اوژه، یک درک جامع و اساسی نیاز است که مربوط به رابطهٔ دقیق میان بهرهٔ شکست دوگانه و موقعیت ید-۱۲۵ باشد. دسترسی به یافته‌های تئوری با مونت‌کارلو می‌تواند به ما برای رسیدن به نتایج بهتری در مطالعات تجربی کمک کند؛ بنابراین، روش شبیه‌سازی در حوزهٔ ابعاد سلولی کمک می‌کند تا با انتخاب هندسه و رادیونوکلئید مناسب، به شرایط آزمایشگاهی نزدیک شود و درنتیجه سبب می‌گردد یافته‌های به‌دست‌آمده در این حوزه، ما را در انتخاب رادیوداروهای مناسب گسیلندهٔ الکترون اوژه و طراحی درمان هدفمند یاری کند.

[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-11]

[DOI: 10.29252/sjimu.28.5.103]

References

1.Nikjoo H, Taleei R, Liamsuwan T, Liljequist D, Emfietzoglou D. Perspectives in radiation biophysics from radiation track structure simulation to mechanistic models of DNA damage and repair. Rad Phys Chem 2016;128:3-10. doi.10.1016/j.radphyschem.2016.05.005

2.Balagurumoorthy P, Xu X, Wang K, Adelstein SJ, Kassis AI. Effect of distance between decaying 125I and DNA on auger electron induced double strand break yield. Int J Rad Biol 2012;88:998-1008. doi.10.3109/09553002.2012.706360

3.Piroozfar B, Raisali G, Alirezapour B, Mirzaii M. The effect of 111In radionuclide distance and auger electron energy on direct induction of DNA double strand breaks a Monte Carlo study using Geant4 toolkit. Int J Rad Biol 2018;94:385-93. doi:10.1080/09553002.2018.1440329

4.Mokari M, Alamatsaz MH, Moeini H, Babaeibrojeny AA, Taleei R. Track structure simulation of low energy electron damage to DNA using Geant4 DNA. Biomed Phys Eng Exp 2018;4: 65009.

5.Francis Z, Incerti S, Karamitros M, Tran H, Villagrasa C. Stopping power and ranges of electrons, protons and alpha particles in liquid water using the Geant4 DNA package. Nucl Ins Meth Phys Res Sec Mate At. 2011;269:2307-11. doi.10.1016/j.nimb.2011.02.031

6.Freudenberg R, Kotzerke J. Cellular dosimetry using the Geant4 Monte Carlo toolkit. J Nucl Med2010;51:1488-9.

7.Leaf nosed bat. Encyclopedia britannica. 5th ed. Sunders Publication. 2009.P.231-9.

8.Tajik M, Rozatian AS, Semsarha F. Simulation of ultrasoft X rays induced DNA damage using the Geant4 Monte Carlo toolkit. Nucl Ins Meth Phys Res Sec Mate At.2015;342:258-65. doi.10.1016/j.nimb.2014.10.023

9.Friedland W, Dingfelder M, Kundrat P, Jacob P. Track structures DNA targets and radiation effects in the biophysical Monte Carlo simulation code PARTRAC. Mut Res Fund Mole Mech Mut 2011;711:28-40. doi.10.1016/j.mrfmmm.2011.01.003

10.Nikjoo H, Uehara S, Emfietzoglou D, Cucinotta F. Track structure codes in radiation research. Rad Meas2006;41:1052-74. doi.10.1016/j.radmeas.2006.02.001

11.Wilson WE, Nikjoo H. A Monte Carlo code for positive ion track simulation. Rad Environ Biophys1999;38:97-104. doi.10.1007/s004110050144

12.Wälzlein C, Scifoni E, Kramer M, Durante M. Simulations of dose enhancement for heavy atom nanoparticles irradiated by protons. Phys Med Biol2014;59:1441.

13.Plante I, Cucinotta FA. Multiple CPU computing the example of the code RITRACKS. Int Meet Comp Int Meth Bioinfo Bios 2012;2:123-8.

14.Uehara S, Nikjoo H, Goodhead D. Cross sections for water vapour for the Monte Carlo electron track structure code from 10 eV to the MeV region. Phys Med Biol1993;38:1841.

15.Agostinelli S, Allison J, Amako K, Apostolakis J, Araujo H, Arce P, et al. Geant4 a simulation toolkit. Nucl Ins Meth Phys Res Sec Equ 2003;50:250-303. doi.10.1016/S0168-9002(03)01368-8

16.Lampe N, Karamitros M, Breton V, Brown JMC, Kyriakou I, Sakata D, et al. Mechanistic DNA damage simulations in Geant4 DNA part 1 a parameter study in a simplified geometry. Phys Med 2018;48:135-45. doi.10.1016/j.ejmp.2018.02.011

17.Sakata D, Lampe N, Karamitros M, Kyriakou I, Belov O, Bernal MA, et al. Evaluation of early radiation DNA damage in a fractal cell nucleus model using Geant4 DNA. Phys Med 2019;62:152-7. doi.10.1016/j.ejmp.2019.04.010

18.Incerti S, Kyriakou I, Bernal M, Bordage M, Francis Z, Guatelli S, et al. Geant4 DNA example applications for track structure simulations in liquid water a report from the Geant4 DNA Project. Med Phys 2018;45:722-39. doi.10.1002/mp.13048

19.Bernal MA, Bordage MC, Brown JMC, Davidkova M, Delage E, El Bitar Z, et al. Track structure modeling in liquid water: A review of the Geant4 DNA very low energy extension of the Geant4 Monte Carlo simulation toolkit. Phys Med 2015;31:861-74.

20.Semsarha F, Goliaei B, Raisali G, Khalafi H, Mirzakhanian L. An investigation on the radiation sensitivity of DNA conformations to 60Co gamma rays by using Geant4

[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-11]

[DOI: 10.29252/sjimu.28.5.103]

toolkit. Nucl Ins Meth Phys Res Sec Int Mate At2014;323:75-81.
doi.10.1016/j.nimb.2014.01.002
21.Chauvie S, Francis Z, Guatelli S, Incerti S, Mascialino B, Montarou G, et al. Monte Carlo simulation of interactions of radiation with biological systems at the cellular and DNA levels. Phys Med 2006;3:72-6.
22.Tajik M, Rozatian AS, Semsarha F. Calculation of direct effects of 60Co gamma rays on the different DNA structural levels a simulation study using the Geant4 DNA toolkit. Nucl Ins Meth Phys Res Sec Int Mate At2015;346:53-60.
doi.10.1016/j.nimb.2015.01.042
23.Incerti S, Douglass M, Penfold S, Guatelli S, Bezak E. Review of Geant4 DNA applications for micro and nanoscale simulations. Phys Med 2016;32:1187-200. doi:10.1016/j.ejmp.2016.09.007
24.Kyriakou I, Incerti S, Francis Z. Technical Note improvements in geant4 energy loss model and the effect on low-energy electron transport in liquid water. Med Phys 2015;42:3870-6. doi.10.1118/1.4921613
25.Howell RW. Radiation spectra for Auger electron emitting radionuclides report No two of AAPM nuclear medicine task group no six. Med Phys 1992;19:1371-83. doi. 10.1118/1.596927
26.Pomplun E. A new DNA target model for track structure calculations and its first application to i-125 Auger electrons. Int J Rad Biol 1991;59:625-42. doi.10.1080/09553009114550561
27.Pomplun E. 123I calculation of the Auger electron spectrum and assessment of the strand breakage efficiency. Biophys Am Phys Med Sym Proce1992; 8:253-8. Doi.10.1080/09553009114550561
28.Nikjoo H, Emfietzoglou D, Liamsuwan T, Taleei R, Liljequist D, Uehara S. Radiation track DNA damage and response a review. Rep Prog Phys Soc 2016;79:116601.
29.Humm JL, Charlton DE. A new calculational method to assess the therapeutic potential of auger electron emission. Int J Rad Oncol Biol Phys 1989;17:351-60. doi.10.1016/0360-3016(89)90450-1
30.Raisali G, Mirzakhanian L, Masoudi SF, Semsarha F. Calculation of DNA strand breaks due to direct and indirect effects of Auger electrons from incorporated 123I and 125I radionuclides using the Geant4 computer code. Int J Rad Biol 2013;89:57-64. doi.10.3109/09553002.2012.715785

[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-11]

[DOI: 10.29252/sjimu.28.5.103]

Calculation of the Damage Induced by Radionuclide 125I at Different Intervals from the DNA Central Axis based on an Atomic Model using the Geant4-DNA Toolkit

Ahmadi P[1], Shamsaizafarghandi M[2], Shokri A[1]*

(Received: June 15, 2020 Accepted: November 16, 2020)

Abstract

Introduction: This study proposed a method to investigate the damage caused by Auger emitter radionuclide radiation.

Materials & Methods: This study investigated the detailed rate of breaks induced by iodine radionuclide at different intervals from the DNA center using the Geant4-DNA toolkit and based on the atomic geometric model.

Findings: The mean number of breaks in DNA is shown as a function of distance from the center of the DNA axis to the position of Auger emission radionuclide decay.

Discussions & Conclusions: The highest damage occurs by electrons with energies below 1 keV, especially in the proximity of DNA.

Keywords: Auger electron, Double strand break, Geant4-DNA, Radionuclide

1. Dept of Physics, Payame Noor University, Tehran, Iran
2. Faculty of Energy Engineering and Physics, Amirkabir University, Tehran, Iran
**Corresponding author Email:pysham@aut.ac.ir*

Scientific Journal of Ilam University of Medical Sciences

[Downloaded from sjimu.medilam.ac.ir on 2026-11-11]

[DOI: 10.29252/sjimu.28.5.103]