

## بررسی آسیب‌های الکترونی‌های کم‌انرژی بر ساختار مولکول تتراهایدروفوران DNA با ابزار Geant4-DNA و محاسبات DFT

معصومه محمودی‌داریان<sup>۱\*</sup>، الهام قویدل<sup>۲</sup> و اعظم ذبیحی<sup>۳</sup>

<sup>۱</sup>گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه آزاد اسلامی واحد کرج، کرج، البرز، ایران.

<sup>۲</sup>مرکز تحقیقاتی فیزیک یونی و فیزیک کاربردی، دانشگاه اینسبروک، اینسبروک، اتریش.

<sup>۳</sup>مرکز نجوم نیکلاس کوپرنیک آکادمی علوم لهستان، مؤسسه استرومنت، ورشو، لهستان.

\*البرز، کرج، دانشگاه آزاد اسلامی واحد کرج، دانشکده علوم، گروه فیزیک، کدپستی: ۳۱۴۹۹۶۸۱۱۱

پست الکترونیکی: m.darian@kiaou.ac.ir

### چکیده

برهم‌کنش الکترونی‌های کم‌انرژی با ترکیبات مولکولی هیدراته شده اهمیت بسیار زیادی در فرآیندهای رادیوبیولوژیکی از جمله پرتودرمانی دارد. مطالعه حاضر به بررسی اثر الکترونی‌های ثانویه ( $70 \text{ eV}$ ) تولید شده از تابش پرتو گاما و پرتو ایکس در پرتودرمانی بر مولکول تتراهایدروفوران در بخش استخوان‌بندی DNA می‌پردازد. با استفاده از ابزار Geant4-DNA انرژی‌های انباشت شده روی مولکول هدف به‌دست آمدند و آثار مستقیم تابش مورد بررسی قرار گرفتند. با استفاده از محاسبات DFT انرژی‌های لازم جهت تولید کاتیون‌های محتمل ناشی از برهم‌کنش الکترونی‌های کم‌انرژی با مولکول هدف محاسبه گردیدند. نتایج DFT و مقایسه آن با میزان انرژی انباشت شده روی مولکول توسط باریکه الکترونی نشان می‌دهد که الکترونی‌های کم‌انرژی قادر هستند پایداری مولکول را از بین ببرند و باعث تجزیه مولکولی و شکست حلقه مولکول تتراهایدروفوران شوند. وجود پیوندهای هیدروژنی آب-تتراهایدروفوران این شکست را ایجاد می‌کنند.

کلیدواژگان: آسیب پرتویی، تتراهایدروفوران، یونش الکترونی، DNA backbone، Geant4-DNA، DFT.

### ۱. مقدمه

همان‌طور که می‌دانیم در رادیولوژی و در درمان بعضی از بیماری‌ها از تابش‌های پراانرژی مانند پرتو ایکس و پرتو گاما استفاده می‌شود. هنگامی که تابش پراانرژی به یک بافت زنده تابانده می‌شود، ذرات ثانویه زیادی تولید می‌شوند. مهم‌ترین آن‌ها الکترونی‌های کم‌انرژی با انرژی کمتر از ۱۰۰ الکترون‌ولت هستند. این الکترونی‌ها را الکترونی‌های ثانویه می‌نامند.

همان‌طور که می‌دانیم در رادیولوژی و در درمان بعضی از بیماری‌ها از تابش‌های پراانرژی مانند پرتو ایکس و پرتو گاما استفاده می‌شود. هنگامی که تابش پراانرژی به یک بافت زنده تابانده می‌شود، ذرات ثانویه زیادی تولید می‌شوند. مهم‌ترین آن‌ها الکترونی‌های کم‌انرژی با انرژی کمتر از ۱۰۰ الکترون‌ولت هستند. این الکترونی‌ها را الکترونی‌های ثانویه می‌نامند.

<sup>1</sup> Sugar-phosphate

<sup>2</sup> Adenine

برای بررسی اثر محیط آبی بر روی تجزیه مولکولی، آزمایش‌هایی با تکنیک‌های مختلف از جمله اسپکتروسکوپی جرمی بر روی خوشه‌های خالص و هیدراته شده بیومولکول‌ها چه در حالت کاتیونی و چه در حالت آنیونی صورت گرفته است [۱۳-۱۸]. به این ترتیب که اثر حلال بر روی تجزیه مولکول با اندازه‌گیری شدت یون‌های حاصل از تجزیه مولکول بر اثر برخورد الکترون‌ها اندازه‌گیری می‌شود. نتایج حاصل از این تحقیقات نشان می‌دهد با این‌که محیط آب نقش یک محافظ را ایفا می‌کند و با توزیع انرژی آزاد مازاد سبب کاهش تجزیه مولکولی می‌شود ولی کانال‌های جدیدی را در تجزیه مولکول نیز به وجود می‌آورد [۱۸].

در مطالعه حاضر ما تصمیم گرفتیم تا با استفاده از کد شبیه‌سازی مونت کارلو به بررسی اثرات زیستی الکترون‌های کم‌انرژی در محدوده انرژی ۷۰ الکترون‌ولت بر روی مولکول تراهایدروفوران<sup>۷</sup> (THF) بپردازیم و انرژی‌های انباشت شده از برهم‌کنش الکترون با مولکول THF را به دست آوریم. لازم است در این‌جا به این نکته اشاره کنیم که علت انتخاب باریکه الکترونی ۷۰ eV به دلیل پژوهشی است که قبلاً انجام داده‌ایم [۱۸]. کاتیون‌های حاصل از این پژوهش توسط اسپکترومتر جرمی ثبت شدند. به این ترتیب قادر هستیم تا مقایسه دقیق‌تری با کاتیون‌های محتمل پیش‌بینی شده توسط محاسبات DFT داشته باشیم. با استفاده از محاسبات DFT احتمال تولید کاتیون‌های محتمل به واسطه انرژی‌های انباشت شده بر روی پیوندهای مختلف مولکول THF را محاسبه می‌کنیم. با این روش در صورتی که به نتایج تجربی تأیید شده ناشی از آسیب مولکولی توسط الکترون‌های کم‌انرژی دسترسی داشته باشیم، می‌توانیم تقریب خوبی از درصد ایمنی روش پرتودرمانی و هم‌چنین درصد آسیب مولکول در گستره انرژی

تیمین<sup>۱</sup>، سیتوزین<sup>۲</sup> و گوانین<sup>۳</sup> که توسط پیوندهای کووالانسی به بدنه DNA متصل شده‌اند، شوند. این آسیب می‌تواند یا به صورت مستقیم به واسطه یونیزاسیون و یا به صورت غیر مستقیم به واسطه تولید رادیکال‌هایی مانند OH<sup>•</sup> در محیط آبی صورت گیرد [۲-۵]. تخریب چهار مولکول نوکلئوتیدی به واسطه تابش الکترونی سبب شکسته شدن پیوندهای کووالانسی بین مولکول‌ها و هم‌چنین پیوند بین این مولکول‌ها و ساختار اسکلتی DNA می‌شود که به نوبه خود می‌تواند منجر به بیماری‌هایی مانند سرطان شود. این آسیب از طریق فرآیندهایی به نام‌های "واپاشی مولکولی به واسطه جذب الکترون"<sup>۴</sup>، "برانگیختگی الکترونی"<sup>۵</sup> و هم‌چنین "یونیزاسیون تجزیه‌ای"<sup>۶</sup> صورت می‌گیرد [۶، ۷].

به منظور مشخص کردن حساس‌ترین قسمت DNA و RNA به الکترون‌های کم‌انرژی، آزمایش‌هایی بر روی نوکلئوتیدهای DNA و گروه‌های قند-فسفات انجام شده است [۸-۱۱]. آزمایش‌ها نشان داده‌اند که بخش قند دی‌اکسی‌ریبوز مهم‌ترین قسمت برای الکترون‌ها جهت ایجاد شکست در رشته پلیمری DNA و RNA است [۱۲]. به همین دلیل مطالعه بر روی گروه‌های قند-فسفات از اهمیت بالایی برخوردار است. به همین منظور آزمایش‌های بسیاری در فاز گازی بر روی اجزای سازنده مولکول‌های بزرگ مانند DNA و یا پروتئین‌ها انجام گرفته است. اما نکته حائز اهمیت این است که در فاز گازی بسیاری از ویژگی‌های ذاتی مولکول‌ها مخفی می‌ماند. به همین دلیل برای تشخیص اثر محیط واقعی (آب) بر روی مولکول‌های زیستی به خصوص پیوندهای هیدروژنی، نحوه آزمایش و محاسبات باید تغییر کند.

<sup>1</sup> Thymine

<sup>2</sup> Cytosine

<sup>3</sup> Guanine

<sup>4</sup> Dissociative electron attachment

<sup>5</sup> Electron excitation

<sup>6</sup> Dissociative ionization

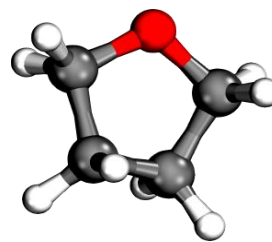
<sup>7</sup> Tetrahydrofuran

تابانده شده به دست آوریم. شبیه‌سازی در کنار محاسبات DFT، نتایج را با دقت بالاتری ارائه می‌دهند.

## ۲. مواد و روش‌ها

### ۱.۲. ماده هدف

تتراهیدروفوران ( $C_4H_8O$ ) معمولاً به عنوان ساده‌ترین مدل مولکولی دی‌اکسی ریبوز به کار برده می‌شود که گروه‌های فسفات را در DNA به هم مربوط می‌سازد. تتراهیدروفوران یک اتر مدور با یک اتم اکسیژن و چهار واحد  $CH_2$  است که در پنج گوشه حلقه قرار گرفته‌اند (شکل ۱). این مولکول قادر است یک مدل ساده جهت بررسی سازوکارهای ممکن ناشی از برهم‌کنش الکترون-مولکول در تجزیه و شکست DNA فراهم سازد.



شکل (۱): ساختار مولکولی تتراهیدروفوران.

### ۲.۲. کد مونت‌کارلوی شبیه‌سازی

برای شبیه‌سازی از ابزار Geant4-DNA و نسخه ۵-۱۰ آن استفاده شده است. این ابزار متن باز و رایگان بوده و براساس زبان ++C طراحی شده است [۱۹]. در این پژوهش از بسته مخصوص انرژی‌های پایین Geant4-DNA و کلاس G4EmDNAPhysics استفاده شده است. فرآیندها و مدل‌های موجود در Geant4-DNA این اجازه را می‌دهند که گام به گام برهم‌کنش ذرات در آب مایع و چند ماده‌ی دیگر سازنده‌ی DNA تا مرتبه الکترون ولت را ردیابی کنیم. هدف اصلی این مقاله شبیه‌سازی و یافتن انرژی انباشت شده بر روی

یک ماده جدید به نام مولکول THF که به فیزیک DNA اضافه شده، می‌باشد. بنابراین از مثال مرتبط (مثال ICSD) و از فیزیک لیستی که به این منظور طراحی شده بود، استفاده گردید. در این فیزیک لیست تک‌تک فرآیندها بازفراخوانی شده‌اند. فیزیک لیست مورد استفاده به شرح زیر طراحی شده است: برای ماده آب مایع از Classical Geant4-DNA Models و برای مواد سازنده‌ی مولکول DNA از PTB Models استفاده شد. سپس شیئی از G4DNAModelInterface برای هر کدام از برهم‌کنش‌های یونیزاسیون، برانگیختگی و برخورد الاستیک ساخته شد. در ادامه G4DNAModel برای G4DNAModelInterface مرتبط ثبت گردید. برای مدل‌های آب مایع نام ذره می‌بایست به تابع RegisterModel اضافه شود ولی برای مدل‌های مواد مشابه DNA و Vacuum به پارامتر دیگری نیاز نبود. در پایان شیئی G4DNAProcesses ساخته شد و G4DNAModelInterface مربوطه در آن ثبت گردید. G4DNAModelInterface مانند G4VEModel کلاسیک عمل می‌کند. لازم به ذکر است که برای این مواد جدید DNA که در این مقاله مولکول THF است، فرآیندهایی که به واسطه برهم‌کنش ذرات الکترون با مولکول THF از انرژی ۱۲ eV تا ۱ KeV صورت می‌گیرد، شامل فرآیندهای یونیزاسیون، برانگیختگی و برخورد الاستیک در دسترس است. مقدار برش برای همه ذرات در این فیزیک، ۱ nm در نظر گرفته شده است. تا قبل از نسخه ۵-۱۰ تنها فیزیک برهم‌کنش پرتوهای مختلف با آب در فیزیک DNA در دسترس بود و در این نسخه همان‌طور که اشاره شد، فیزیک برهم‌کنش پرتوهای مانند الکترون با ماده THF هم اضافه شده است. لازم به ذکر است که از قابلیت محاسبات شیمیایی Geant4-DNA استفاده نشده است و فقط آثار مستقیم آن مورد بررسی قرار گرفته است.

## ۱.۲.۲. هندسه هدف زیستی

در شبیه‌سازی انجام شده، کره‌ای به ابعاد هسته سلول زیستی با شعاع ۲/۹۳ میکرومتر که همان شعاع میانگین شعاع هسته‌ای موجود است [۲۰] و با ماده "G4\_WATER" پر شده، در نظر گرفته می‌شود. سپس مولکول THF درون استوانه‌هایی به ابعاد رشته‌های DNA (قطر ۲/۳ و ارتفاع ۳/۴ نانومتر) که مطابق با ابعاد مدل اتمی یک نوع مولکول B-DNA از کتابخانه PDB که شامل ۱۰ جفت باز است، قرار می‌گیرد و این استوانه‌ها نیز به‌طور تصادفی در محیط توزیع می‌گردند. پس از توزیع تصادفی استوانه‌ها در محیط، ذرات الکترون تک‌انرژی با انرژی ۷۰ eV به‌صورت تصادفی درون هسته سلول تابیده می‌شوند. انتخاب فیزیک G4EmDNAPhysics قادر است برهم‌کنش الکترون‌ها را با ماده آب و نیز مولکول THF ردیابی کرده، یونیزاسیون و برانگیختگی رخ داده شده در مولکول‌ها را مشخص نماید [۲۱-۲۹]. در این پژوهش تنها آثار مستقیم تابش بررسی خواهد شد.

## ۳.۲. محاسبات تئوری انرژی آشکارسازی کاتیون‌های

## حاصل از تجزیه مولکول به روش DFT

جهت محاسبه انرژی لازم برای تولید کاتیون‌های محتمل بر اثر برهم‌کنش الکترون با مولکول THF در محیط آبی و بررسی تأثیرات شیمیایی ناشی از فرایندهای مستقیم فیزیکی که همان انرژی‌های انباشت منتهی به یونیزاسیون می‌باشد، روش پیوستار قطبی‌پذیر (PCM) برای توصیف اثر محیط آبی با محاسبات

نظریه تابع چگالی ترکیب شد و در نرم‌افزار Gaussian 16 محاسبه گردید. در این مطالعه ساختار مولکولی تتراهایدروفوران به‌صورت کوانتوم مکانیکی توصیف می‌شود. در حالی که اثر محیط مایع به‌عنوان یک پیوستار در نظر گرفته شده که برهم‌کنش آن با ساختار مولکولی به‌واسطه گذردهی محیط مایع است [۳۰، ۳۱]. ابتدا ساختار مولکولی تتراهایدروفوران و کاتیون‌های محتمل و حاصل از برهم‌کنش این مولکول با باریکه الکترونی به‌وسیله نرم‌افزار Avogadro ترسیم و با روش DFT و در سطح محاسباتی B3LYP/aug-cc-pVDZ بهینه‌سازی شدند. در گام بعدی، اثر محیط آبی و برهم‌کنش آن با ساختارهای مولکولی مدنظر قرار گرفت و پارامترهایی چون ساختارهای بهینه، فرکانس‌های ارتعاشی و انرژی آزاد سیستم با احتساب مقدار انرژی نقطه صفر به‌دست آمد. این محاسبات امکان بررسی میزان پیشرفت واکنش‌های شیمیایی ساختار تتراهایدروفوران در محیط آب را فراهم می‌کند.

## ۳. بحث و نتایج

با استفاده از ابزار Geant4-DNA انرژی‌های انباشت شده بر روی مولکول هدف به واسطه برهم‌کنش با الکترون محاسبه شدند. در جدول ۱ انرژی‌های منتقل شده از باریکه الکترونی پس از عبور از محیط آبی و برهم‌کنش با مولکول THF نمایش داده شده‌اند. مقادیر برحسب الکترون ولت می‌باشند.

جدول (۱): انرژی‌های انباشت شده بر روی مولکول THF توسط باریکه الکترونی پس از برهم‌کنش.

E (eV)	۹/۷۴	۱۲/۳۱	۱۲/۹۹	۱۳/۵۷	۱۳/۶۰	۱۵/۱۱	۱۵/۹۷	۱۶/۲۸	۱۸/۱۹	۲۲/۱۴	۲۲/۲۵
--------	------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------

به‌همین دلیل با استفاده از روش DFT به بررسی بیشتر ساختار مولکولی پرداختیم. نتایج حاصل از محاسبات DFT در جدول ۲ نمایش داده شده‌اند.

با توجه به این‌که Geant4-DNA قادر به تشخیص میزان تخریب وارد بر مولکول هدف به واسطه تولید کاتیون‌های حاصل از این انرژی‌های منتقل شده به مولکول نمی‌باشد،

که در جرم ۷۱ احتمال وقوع دو واکنش برای تولید کاتیون  $C_4H_7O^+$  وجود دارد. با توجه به این‌که میزان انرژی لازم  $4/61 \text{ eV}$  برای آشکار شدن کاتیون مورد نظر کمتر از مسیر اول است، پس به نظر می‌رسد که فرآیند مورد نظر مسیر دوم را برای تولید کاتیون  $C_4H_7O^+$  انتخاب کند. در جرم ۴۲، سه احتمال برای تولید کاتیون  $C_3H_6^+$  وجود دارد. مسیر اول با انرژی آشکارسازی  $1/64 \text{ eV}$  محتمل‌ترین مسیر ممکن برای تولید کاتیون مورد نظر است.

در ستون اول از سمت چپ کاتیون‌هایی انتخاب شده‌اند که در پژوهش قبلی ما از بیشترین شدت ممکن در طیف حاصل از اسپکترومتر جرمی ناشی از برهم‌کنش الکترون‌های کم‌انرژی با مولکول THF برخوردار هستند [۱۸]. ستون دوم جرم مولکولی کاتیون‌های مورد نظر را نشان می‌دهد. در ستون سوم نتایج حاصل از محاسبات DFT قرار داده شده‌اند. در این ستون محتمل‌ترین واکنش‌های ممکن به دست آمده‌اند. اگر به این ستون دقت کنیم، متوجه می‌شویم

جدول (۲): انرژی‌های آشکارسازی کاتیون‌های حاصل از تجزیه مولکول THF در محیط آبی.

کاتیون	جرم مولکولی (amu)	واکنش‌های محتمل	انرژی آشکار شدن (eV)
$C_4H_8O^+$	۷۲	$C_4H_8O \rightarrow C_4H_8O^+ + e^-$	۶/۹۲
$C_4H_7O^+$	۷۱	$C_4H_8O \rightarrow C_4H_7O^+ + H + e^-$	۱۱/۵۳
		$C_4H_8O^+ \rightarrow C_4H_7O^+ + H$	۴/۶۱
$C_3H_6^+$	۴۲	$C_4H_8O^+ \rightarrow C_3H_6^+ + CH_2O$	۱/۶۴
		$C_4H_8O^+ \rightarrow C_3H_6^+ + CO + H_2$	۲/۳۱
		$C_4H_8O^+ \rightarrow C_3H_6^+ + C + H_2O$	۷/۶۰
$C_3H_5^+$	۴۱	$C_4H_8O^+ \rightarrow C_3H_5^+ + CH_3O$	۴/۶۶
		$C_4H_8O^+ \rightarrow C_3H_5^+ + CH_2O + H$	۶/۸۰
$C_2H_3^+$	۲۷	$C_4H_8O^+ \rightarrow C_2H_3^+ + CH_2O + CH_3$	۴/۵۴
$C_2H_2O^+$	۴۳	$C_4H_8O^+ \rightarrow C_2H_2O^+ + C_2H_4 + H$	۲/۴۱
$C_2H_4O^+$	۴۴	$C_4H_8O^+ \rightarrow C_2H_4O^+ + C_2H_4$	۱/۳۴

سطح انرژی‌های بسیار پایین‌تری تولید می‌شوند. برای مقایسه بهتر در جدول ۳ نتایج به دست آمده از چند گروه کاری را که در فاز گازی با تکنیک‌های مختلفی کار کرده‌اند، قرار داده‌ایم. مراجع در توضیحات جدول ارائه شده‌اند.

با این‌که نتایج حاصل از پژوهش قبلی ما [۱۸] نشان می‌دهد که آب اثر محافظتی دارد و با توزیع مجدد انرژی منجر به ضعیف شدن تجزیه مولکول THF می‌شود، ولی مقایسه نتایج حاصل در فاز گازی و محیط آبی در این مقاله به خوبی نشان می‌دهد که محیط آبی یعنی پیوند هیدروژنی بین مولکول THF و آب به طور قابل توجهی قادر است پایداری پیوندهای کووالانسی موجود در حلقه مولکول را تحت تأثیر قرار دهد.

در جرم ۴۱ نیز دو مسیر ممکن جهت تولید کاتیون  $C_3H_5^+$  نشان داده شده است که با توجه به پایین بودن میزان انرژی لازم برای آشکار شدن کاتیون مورد نظر از مسیر اول یعنی  $4/66 \text{ eV}$ ، می‌توان این مسیر را محتمل‌تر از مسیر دوم دانست. واکنش‌ها نشان می‌دهند که از جرم ۴۲ به بعد، کاتیون‌های حاصل ناشی از شکست حلقه مولکول می‌باشند.

اگر نتایج این محاسبات را که میزان انرژی‌های لازم جهت تولید کاتیون‌های محتمل بر اثر برهم‌کنش الکترون‌های کم‌انرژی با مولکول THF در محیط آبی است را با نتایج میزان انرژی‌های لازم جهت تولید همین کاتیون‌ها در فاز گازی مقایسه کنیم، متوجه می‌شویم که در محیط آبی کاتیون‌ها در

#### ۴. نتیجه گیری

این پژوهش با کمک ابزار Geant4-DNA و محاسبات DFT به بررسی تخریب مولکول THF تحت تابش الکترون‌های کم‌انرژی ۷۰ eV پرداخت. با استفاده از Geant4-DNA انرژی‌های انباشت شده بر روی مولکول هدف و با محاسبات DFT انرژی‌های لازم جهت آشکار و تولید شدن کاتیون‌های حاصل از برهم‌کنش THF و الکترون به دست آمدند. مقایسه بزرگی انرژی‌های انباشت شده از باریکه الکترونی بر روی کل مولکول هدف و انرژی لازم جهت تولید کاتیون‌های محتمل نشان می‌دهد که الکترون‌های ثانویه قادر به تخریب حلقه مولکول و در نتیجه شکست DNA هستند. از طرفی مقایسه نتایج به دست آمده برای انرژی لازم جهت تولید کاتیون‌های محتمل در دو فاز گازی و آبی نشان می‌دهد که با این که محیط آبی قادر است نقش یک محافظ را برای مولکول THF در تجزیه مولکولی داشته باشد اما از طرفی پیوند هیدروژنی بین مولکول آب و مولکول THF باعث می‌شود تا آب به صورت یک کاتالیست عمل کند و سبب تخریب حلقه مولکول شود. پژوهش اخیر می‌تواند به ما کمک کند تا در روش‌های درمانی با استفاده از پرتوها جوانب مختلف را در نظر بگیریم.

#### ۵. تشکر و قدردانی

بر خود لازم می‌دانم از پروفیسور پاول که در دانشگاه اینسبروک امکان استفاده از کامپیوتر محاسباتی را برای محاسبات DFT فراهم کردند، تشکر و قدردانی نمایم.

به نظر می‌رسد که با اتصال مولکول آب به مولکول THF از راه پیوند هیدروژنی، الکترون از اربیتال HOMO مولکول THF جابه‌جا می‌شود. نتایج حاصل از این تحقیق و پژوهش‌های دیگر [۳۵] نشان می‌دهند که آب می‌تواند اثر کاتالیزوری بر روی انرژی آشکارسازی کاتیون‌ها داشته باشد و با تجزیه کاتیون مادر و ایجاد کاتیون‌های ثانویه باعث تخریب ساختار حلقه THF شود. به نظر می‌رسد که نقش کاتالیستی آب و نقش محافظتی آن دو فرآیندی هستند که با یکدیگر در رقابت می‌باشند.

جدول (۳): انرژی آشکار شدن (بر حسب eV) کاتیون‌های حاصل از برهم‌کنش الکترون‌های کم‌انرژی در فاز گازی توسط سه گروه Mayer [۳۲] با تکنیک یونیزاسیون فوتونی (PI)، گروه Gallegos [۳۳] با تکنیک یونیزاسیون الکترونی (EI) و گروه Collin با تکنیک یونیزاسیون الکترونی [۳۴].

کاتیون Amu	Mayer et al	Gallegos and Kiser	Collin and Conde capras
۷۲	۹/۴۵ ± ۰/۱۰	۹/۴۵ ± ۰/۱۵	۹/۵۵
۷۱	۱۰/۰ ± ۰/۱	۱۱/۱ ± ۰/۲	۱۰/۴۴
۴۵	۱۲/۱۵ ± ۰/۱۰		
۴۴	۱۱/۰ ± ۰/۱		۱۲/۲۷
۴۳	۱۰/۹ ± ۰/۲	۱۲/۸ ± ۰/۲	۱۱/۸۷
۴۲	۱۰/۶۵ ± ۰/۲۰	۱۲/۷ ± ۰/۲	۱۱/۵۴
۴۱	۱۲/۷ ± ۰/۲	۱۵/۵ ± ۰/۳	۱۳/۷۲
۴۰	۱۲/۹ ± ۰/۲	۱۵/۲ ± ۰/۳	
۳۹	۱۴/۹ ± ۰/۲	۱۸/۷ ± ۰/۶	
۳۸	۲۳/۵ ± ۰/۲		
۳۷	۲۵ ± ۱		
۳۱	۱۱/۸۵ ± ۰/۱۰		
۲۹	۱۲/۵ ± ۰/۲	۱۵/۸ ± ۰/۲	
۲۸	۱۲/۵ ± ۰/۲		
۲۷	۱۳/۳ ± ۰/۱	۱۶/۱ ± ۰/۳	
۲۶	۱۴/۹ ± ۰/۲	۱۷/۳ ± ۰/۳	
۱۶	۱۵/۶ ± ۰/۱		
۱۵	۱۶/۰ ± ۰/۳		
۱۴	۱۹/۵ ± ۰/۵		

## ۶. مراجع

- [1] X. Ren, E. Jabbour Almaalouf, A. Dorn and S. Denifl. Direct evidence of two interatomic relaxation mechanisms in argon dimers ionized by electron impact, *Nature Communications*, 7 (2016) 11093.
- [2] R. Baskar, K.A. Lee, R. Yeo and K.W. Yeoh. Cancer and radiation therapy: current advances and future directions, *International Journal of Medical Sciences*, 9 (2012) 193–199.
- [3] B.D. Michael and P.A. O'Neill. Sting in the tail of electron tracks, *Science*, 287 (2000) 1603–1604.
- [4] M.A. Huels, B. Boudaiffa, P. Cloutier, D. Hunting and L. Sanche. Single, double and multiple double strand breaks induced in DNA by 3-100 eV electrons, *Journal of the American Chemical Society*, 125 (2003) 4467–4477.
- [5] S.M. Pimblott and J.A. Laverne. Production of low-energy electrons by ionizing radiation, *Radiation Physics and Chemistry*, 76 (2007) 1244–1247.
- [6] B. Boudaiffa, P. Cloutier, D. Hunting, M.A. Huels and L. Sanche. Resonant formation of DNA strand breaks by low-energy (3 to 20 eV) electrons, *Science*, 287 (2000) 1658–1660.
- [7] E. Alizadeh and L. Sanche. Precursors of solvated electrons in radiobiological physics and chemistry, *Chemical Reviews*, 112 (2012) 5578–5602.
- [8] S.K. Kim, W. Lee and D.R. Herschach. Cluster beam chemistry: hydration of nucleic acid bases; Ionization potentials of hydrated adenine and thymine, *The Journal of Physical Chemistry*, 100 (1996) 7933–7937.
- [9] Y. Zheng, P. Cloutier, D.J. Hunting, J.R. Wagner and L. Sanche. Phosphodiester and N-glycosidic bond cleavage in DNA induced by 4-15 eV electrons, *The Journal of Chemical Physics*, 124 (2006) 64710.
- [10] T. Solomun, H. Seitz and H. Sturm. DNA damage by low-energy electron impact: dependence on guanine content, *The Journal of Physical Chemistry B*, 113 (2009) 11557–11559.
- [11] Z. Li, Y. Zheng, P. Cloutier, L. Sanche and J.R. Wagner. Low energy electron induced DNA damage: effects of terminal phosphate and base moieties on the distribution of damage, *Journal of the American Society*, 130 (2008) 5612–5613.
- [12] S. Ptasinska, S. Denifl, P. Scheier and T.D. Märk. Inelastic electron interaction (attachment/ionization) with deoxyribose, *The Journal of Chemical Physics*, 120 (2004) 8505–8511.
- [13] S. Heinbuch, F. Dong, J.J. Rocca and E.R. Bernstein. Single photon ionization of hydrogen bonded clusters with a soft x-ray laser: (HCOOH)<sub>x</sub> and (HCOOH)<sub>y</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>z</sub>, *The Journal of Chemical Physics*, 126 (2007) 244301.
- [14] B. Liu, S. Brondsted, P. Hvelplund, H. Zettergren, H. Cederquist, B. Manil and B.A. Huber. Collision-induced dissociation of hydrated adenosine monophosphate nucleotide ions: protection of the ion in water nanoclusters, *Physical Review Letters*, 97 (2006) 13340.
- [15] L. Belau, K.R. Wilson, S.R. Leone and M. Ahmed. Vacuum-ultraviolet photoionization studies of the microhydration of DNA bases (guanine, cytosine, adenine, and thymine), *The Journal of Physical Chemistry A*, 111 (2007) 7562–7568.
- [16] P. Markush, P. Bolognesi, A. Cartoni, P. Rousseau, S. Maclot, R. Delaunay, A. Domaracka, J. Kocisek, M.C. Castrovilli, B.A. Huber and L. Avaldi. The role of the environment in the ion induced fragmentation of uracil, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18 (2016) 16721–16729.
- [17] T. Schlathöler, F. Alvarado, S. Bari, A. Lecointre, R. Hoekstra, V. Bernigaud, B. Manil, J. Rangama and B. Huber. Ion-induced biomolecular radiation damage: From isolated nucleobases to nucleobase clusters, *ChemPhysChem*, 7(2006) 2339–2345.
- [18] M. Neustetter, M. Mahmoodi-Darian and S. Denifl. Study of electron ionization and fragmentation of non-hydrated and hydrated tetrahydrofuran clusters, *Journal of the American Chemical Society for Mass Spectrometry*, 28 (2017) 866–872.
- [19] S. Agostinelli, J. Allison, K.A. Amako, J. Apostolakis, H. Araujo, P. Arce, M. Asai, D. Axen, S. Banerjee and G. Barrand. GEANT4—a simulation toolkit, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 506(3) (2003) 250–303.
- [20] E. Polig, D.B. Kimmel and W.S.S. Jee. Morphology of bone cell nuclei and their location relative to bone surfaces, *Physics in Medicine and Biology*, 29 (1984) 939-952.
- [21] S.A. Zein, M.C. Bordage, Z. Francis, G. Macetti, A. Genoni, C. Dal Capello, W.G. Shin and S. Incerti. Electrons transport in DNA bases: An extension of the Geant4-DNA Monte Carlo toolkit, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 488 (2021) 70-82.
- [22] I. Kyriakou, D. Emfietzoglou and S. Incerti. Status and Extension of the Geant4-DNA Dielectric Models for Application to Electron Transport, *Frontiers in Physics*, 9 (2022) 711317.
- [23] I. Kyriakou, M. Sefl, V. Nourry and S. Incerti. The impact of new Geant4-DNA cross section models on electron track structure simulations in liquid water, *Journal of Applied Physics*, 119 (2016) 194902.
- [24] H.N. Tran, D.D. Dao, S. Incerti, M.A. Bernal, M. Karamitros, T.V. Nhan Hao, T.M. Dang and Z. Francis. Single electron ionization and electron capture cross sections for (C<sub>6</sub><sup>+</sup>, H<sub>2</sub>O) interaction within the Classical Trajectory Monte Carlo (CTMC) approach, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 366 (2016) 140-144.
- [25] I. Kyriakou, S. Incerti and Z. Francis. Improvements in Geant4 energy-loss model and the effect on low-energy electron transport in liquid water, *Medical Physics*, 42 (2015) 3870-3876.
- [26] G. Famulari, P. Pater and S.A. Enger. Microdosimetry calculations for monoenergetic electrons using Geant4-DNA combined with a weighted track sampling

- algorithm, *Physics in Medicine and Biology*, 62 (2017) 5495-5508.
- [27] I. Kyriakou, D. Emfietzoglou, V. Ivanchenko, M.C. Bordage, S. Guatelli, P. Lazarakis, H.N. Tran and S. Incerti. Microdosimetry of electrons in liquid water using the low-energy models of Geant4, *Journal of Applied Physics*, 122 (2017) 024303.
- [28] J. Bordes, S. Incerti, N. Lampe, M. Bardies and M.C. Bordage. Low-energy electron dose-point kernel simulations using new physics models implemented in Geant4-DNA, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 398 (2017) 13-20.
- [29] S. Incerti, I. Kyriakou and H.N. Tran. Geant4-DNA simulation of electron slowing-down spectra in liquid water, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 397 (2017) 45-50.
- [30] J. Tomasi, B. Mennucci and R. Cammi. Quantum Mechanical Continuum Solvation Models, *Chemical Reviews*, 105 (2005) 2999–3093.
- [31] B. Mennucci and R. Cammi. Continuum Solvation Models in Chemical Physics: From Theory to Applications, John Wiley & Sons, Ltd, (2007).
- [32] P.M. Mayer, P.M, M.F. Guest, L. Cooper, L.G. Shpinkova, E.E. Rennie, D.M.P. Holland and D.A. Shaw. Does tetrahydrofuran ring open upon ionization and dissociation? A TPES and TPEPICO investigation, *The Journal of Physical Chemistry A*, 113 (2009) 10923-10932.
- [33] E.J. Gallegos and R.W. Kiser. Electron impact spectroscopy of the four- and five-membered, saturated heterocyclic compounds containing nitrogen, oxygen and sulfur, *The Journal of Physical Chemistry*, 66 (1962) 136-145.
- [34] J.E. Collin and G. Conde-Caprace. Ionization and dissociation of cyclic ethers by electron impact, *International Journal of Mass Spectrometry and Ion Physics*, 1 (1968) 213-225.
- [35] E. Wang, X. Ren, W. Baek, H. Rabus, T. Pfeifer and A. Dorn. Water acting as a catalyst for electron-driven molecular break-up of tetrahydrofuran, *Nature Communications*, 11 (2020) 2194.