

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE**

UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

**FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE
N° : Ph/APP/18/2021**



**FILIERE : PHYSIQUE
OPTION : PHYSIQUE APPLIQUÉE**

**Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique**

Par: FERRADI SALIHA

Intitulé

**Simulation du libre parcours moyen élastique des
collisions d'électrons avec le précurseur des bases
pyrimidiques de l'ADN, cas de la pyrimidine**

Soutenu devant le jury composé de:

Pr Ibrir Miloud	Université de M'sila	Président
Dr Aouina Nabila Yasmina	Université de M'sila	Rapporteur
Dr Megag Nafissa	Université de M'sila	Examineur

Année universitaire : 2020 /2021

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

Dédicaces

Je dédie ce travail

À mon cher père et ma chère mère.

À mes chers frères et sœurs.

À toute ma famille.

À mon cher ami « Assou Ben Cheikh ».

À tous ceux qui ont sacrifié leur temps pour la

science et à tous ceux qui utilisent la science

pour le bien et la prospérité de l'humanité.

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier mon encadreur Dr Aouina Nabila Yasmina d'avoir accepté de diriger ce travail. Ses conseils éclairés m'ont été d'une aide très précieuse. J'exprime ici toute ma gratitude pour la confiance qu'elle m'a accordée, ses compétences scientifiques et ses encouragements qu'elle m'a apportés tout au long de ce travail.

Mes plus sincères remerciements vont d'abord aux membres de jury d'avoir pris le temps de lire ce manuscrit en détail. Tout d'abord, je tiens à exprimer vivement le Dr Ibrir M., Professeur à l'Université de Msila, de m'avoir fait l'honneur de présider mon jury.

Dr Megag N de l'Université de M'sila, m'a fait l'honneur d'examiner ce mémoire

Je remercie également tous les enseignants, Qui n'ont pas épargné leurs efforts et leur temps pour mon enseigne.

Je n'oublie pas non plus de remercier mes collègues et mes amis... surtout "Salima Ardjoum".

Saliha Ferradi

Sommaire

Remerciements	
Abréviations	
Liste des tableaux	
Liste des figures	

Introduction générale	01
------------------------------	-----------

Chapitre I : Les interactions physiques des particules ionisantes avec la matière

I.1. Introduction	03
I.2. Interactions des électrons et des positrons	03
I.3. Interactions des électrons	03
I.3.1. Diffusion élastique	04
I.3.1.1. Électrons rétrodiffusés	06
I.3.2. Diffusion inélastique	06
I.3.2.1. Ionisation et excitation	07
• Excitation	07
• Ionisation	08
• Emission Auger	09
I.3.2.2. Ejection d'un électron secondaire	10
I.3.2.3. Rayonnement de freinage : Bremsstrahlung	11
I.3.2.4. Pouvoir d'arrêt	11
I.4. Interactions des positrons	11
I.5. Phénomène d'annihilation	13

Chapitre II : Pyrimidine précurseur des bases pyrimidiques

II.1. Introduction	14
II.2. Structure de l'ADN	14
II.3. Composants de l'ADN	16
II.3. 1. Nucléotides	16
II.3. 1.1. Désoxyribose	17
II.3.1.2. Groupement phosphate	18
II.3.1.3. Bases azotées	18
II.4. La pyrimidine	18
II.5. Radiolyse de l'eau entourant l'ADN	19
II.6. Lésions fréquentes de l'ADN	20

Chapitre III : Matériels et méthodes

III.1. Introduction	22
III.2. Calcul de sections efficaces élastiques	22
III.3. Calcul des sections efficaces des atomes	23
III.4. La méthode des règles d'additivité avec correction d'écran (SCAR)	26
III.5. Libre parcours moyen élastique des électrons	27

Chapitre IV : Résultats et discussions

IV.1. Sections efficaces élastiques	28
IV.2. Section efficace différentielle élastique	31
IV.3. Libre parcours moyen élastique	32
Conclusion générale	35
Références bibliographiques	155

Abréviations

A : Adénine

ADN : Acide désoxyribonucléique

AR : Règle d'additivité

ARN : Acide ribonucléique

C : Cytosine

CDB : Cassures double brin

CSB : Cassures simple brin

ELSEPA : diffusion élastique des électrons et des positrons par les atomes

FORTTRAN: formula translation

G: Guanine

HF: Hartree – Fock

IAM : méthode de l'atome indépendant

PDF : Fonctions de densité de probabilité

PY : Pyrimidine

SCAR : règles d'additivité avec correction d'écran

T : Thymine

TF: Thomas–Fermi

TFD : Thomas – Fermi – Dirac

TFM : Thomas–Fermi–Molière

U : Uracile

el : élastique

Liste des figures

Chapitre I

Figure I.1 : Schéma des interactions électron-matière résultant de l'impact d'un faisceau d'électrons sur un spécimen	04
Figure I.2 : Phénomène de diffusion élastique	05
Figure I.3 : Électrons rétrodiffusés	06
Figure I.4 : Phénomène d'excitation	07
Figure I.5 : Phénomène d'ionisation	08
Figure I.6 : Emission Auger	09
Figure I.7 : Electron secondaire	10
Figure I.8 : Rayonnement de freinage : Bremsstrahlung	11
Figure I.9 : Phénomène d'annihilation de la matière	13

Chapitre II

Figure II.1 : Les bases azotées peuvent s'associer deux à deux par des liaisons hydrogènes	15
Figure II.2 : De l'ADN à la cellule	16
Figure II.3 : Structures d'un nucléotide	17
Figure II.4 : Structures d'un désoxyribose	17
Figure II.5 : Structures d'un désoxyribose	18
Figure II.6 : Diagramme schématique montrant la structure de la pyrimidine et des bases pyrimidiques (Palihawadana)	19
Figure II.7 : Représentation schématique des principaux dommages de l'ADN produits par des effets directs et indirects	20

Chapitre IV

Figure IV.1 : Sections efficaces élastiques des électrons de l'adénine pour différents potentiels d'interaction	28
--	-----------

Figure IV.2 : Sections efficaces élastiques des électrons de la pyrimidine comparée avec les sections efficaces élastiques des électrons de la cytosine et la thymine.	29
Figure IV.3 : Sections efficaces élastiques des électrons de la pyrimidine comparée avec les sections efficaces élastiques des électrons de Sanz (Sanz 2014), base de données PENELOPE	30
Figure IV.4 : Sections efficaces élastiques différentielles des électrons du pyrimidine,	31
Figure IV.5 : Présent calcul du libre parcours moyen élastique des électrons pour la cytosine, la thymine et la pyrimidine respectivement	32
Figure IV.6 : Présent calcul du libre parcours moyen élastique des électrons comparés au libre parcours moyen élastique de Sanz et al. (2014) et Zecca et al. (2014)	33

Introduction générale

Introduction générale

L'interaction du rayonnement avec l'ADN est un complexe de processus physiques, chimiques et biologiques. En effet, les dimensions de ses composants sont très précises (micro et nano).

L'étude physique de cette interaction nécessite plus de théories physiques et mathématiques afin de l'approcher de la vérité.

Ce mémoire contient trois chapitres. Le premier chapitre parle de l'interaction des particules ionisées, en particulier des électrons, avec la matière en général en raison de son importance dans la compréhension de l'étude avec des matériaux dans des cas particuliers tels que la matière vivante.

Nous savons que les protons et les électrons émis par une source transportent de l'énergie, et c'est cette dernière qui détermine le type d'interaction. On retrouve dans cette section les types d'interactions, diffusion élastique et diffusion inélastique...

On a également abordé la définition de l'interaction entre un électron porteur d'une énergie supérieure à l'énergie de liaison de l'atome ou ce qu'on appelle l'ionisation, le problème de la trajectoire sur l'émission d'électrons des couches de l'atome pour restaurer sa stabilité. L'état du carton est secondaire, c'est-à-dire un électron faiblement lié. Et aussi l'interaction du positon avec la substance. Dans le deuxième chapitre, j'ai traité l'effet biologique des rayonnements ionisants. Où j'ai connu l'ADN pour la première fois car c'est un composant important de la cellule. L'ADN contient deux chaînes enroulées l'une autour de l'autre et chaque chaîne est une union d'un groupe de molécules et d'ions, ou nous disons que c'est une union d'un groupe de nucléotides et chaque nucléotide est constitué d'un sucre désoxygéné, d'une base azotée et d'un phosphate grouper. J'ai aussi expliqué un peu la structure de certaines de ses molécules, mais je me suis concentré dans mon explication sur la molécule de pyrimidine (l'objet de ma recherche), cette molécule à partir de laquelle se forment les bases azotées de la pyrimidine.

Puis j'ai évoqué les cinq types de modifications résultant des deux mécanismes d'interaction avec l'ADN (effets directs et indirect).

Dans le troisième chapitre, nous avons discuté de l'étude graphique afin de déterminer les libres parcours des électrons au sein de la pyrimidine (Précurseur des bases pyrimidiques de l'ADN)

En calculant les sections efficaces élastiques en utilisant les lois de la physique des particules, nous obtenons finalement l'expression de la section efficace totale des collisions élastiques Utilisation Le système de code FORTRAN 77 ELSEPA. Ces codes calculent les sections efficaces des particules.

Ces symboles effectuent des calculs relativistes à ondes partielles de la diffusion par le potentiel de réaction central et le potentiel des électrons émis par analyse relativiste, l'équation de Schrödinger.

Les règles d'addition avec la correction pour SCAR, permettent de déterminer les sections efficaces de molécules hétérogènes (absence de leur centre de symétrie).

Enfin, nous avons trouvé la relation de libres parcours des électrons.

Tout cela nous a conduit à des représentations graphiques des libres parcours des électrons dans le cas des diffusions élastiques et à discuter leurs résultants.

Chapitre I

Les interactions physiques des particules ionisantes avec la matière

I.1. Introduction

L'étude de l'interaction rayonnement-matière a été en grande partie effectuée au vingtième siècle et trouve son origine dans la découverte de la radioactivité par Henri Becquerel en 1895 et du radium par les Curie en 1890. Ces découvertes ont permis des avancées aussi bien fondamentales que technologiques. Le développement historique de la science de la radiologie est lui-même intéressant, et aide à comprendre les quantités et les unités utilisées dans ce domaine aujourd'hui (Aouina, 2020).

Initialement, un rayonnement ionisant est tout rayonnement susceptible d'arracher un électron à la matière ; Lorsque le rayonnement passe à travers la matière, il a la capacité d'ioniser directement ou indirectement les atomes et les molécules, par conséquent, nous utilisons le terme rayonnement ionisant.

Dans le cadre de notre travail, nous considérons que les interactions des particules chargées légères qui désignent ici exclusivement les électrons

I.2. Interactions des électrons et des positrons

En traversant la matière, les particules chargées interagissent principalement avec les électrons et très rarement avec le noyau. Suite aux collisions des particules avec les électrons atomiques, elles déposent leurs énergies soit en les excitants à des niveaux d'énergie plus élevés. Les atomes peuvent retourner à leurs états fondamentaux en émettant des photons (Attix et *al.*, 2008).

Les interactions possibles des électrons et des positrons avec le milieu sont collisions élastiques, collisions inélastiques et émission de Bremsstrahlung; les positrons peuvent aussi subir une annihilation (Salvat et *al.*, 2009)

I.3. Interactions des électrons

L'électron porte une charge électrique négative égale à -1.6×10^{-19} coulombs. La masse d'un électron est d'environ 9.11×10^{-31} kg, ce qui correspond à une masse 1836 fois inférieure à celle du proton. Les électrons peuvent avoir une origine atomique ou nucléaire provenant du cortège électronique des atomes du milieu ou suite à la désintégration radioactive de noyaux (radioactivité β^+ , β^-) respectivement (Lyoussi, 2021).

Les électrons cèdent progressivement leur énergie à la matière. Les différents types de la diffusion des électrons sont bien sûr la base de la plupart des méthodes de microscopie électronique (Heger, 2008). A très haute énergie (>10 MeV), le processus dominant est le rayonnement de freinage (Bremstrahlung): Un électron en mouvement dans le champ coulombien d'un noyau est soumis à des forces d'accélération (Ziad Francis, 2007). Quand un électron interagit avec la matière, différentes interactions peuvent se produire, comme le résume la figure 1. Pour une systématisation, les interactions sont classées en deux différents types, à savoir les interactions élastiques et inélastiques. Ces processus peuvent être catégorisés comme suit:

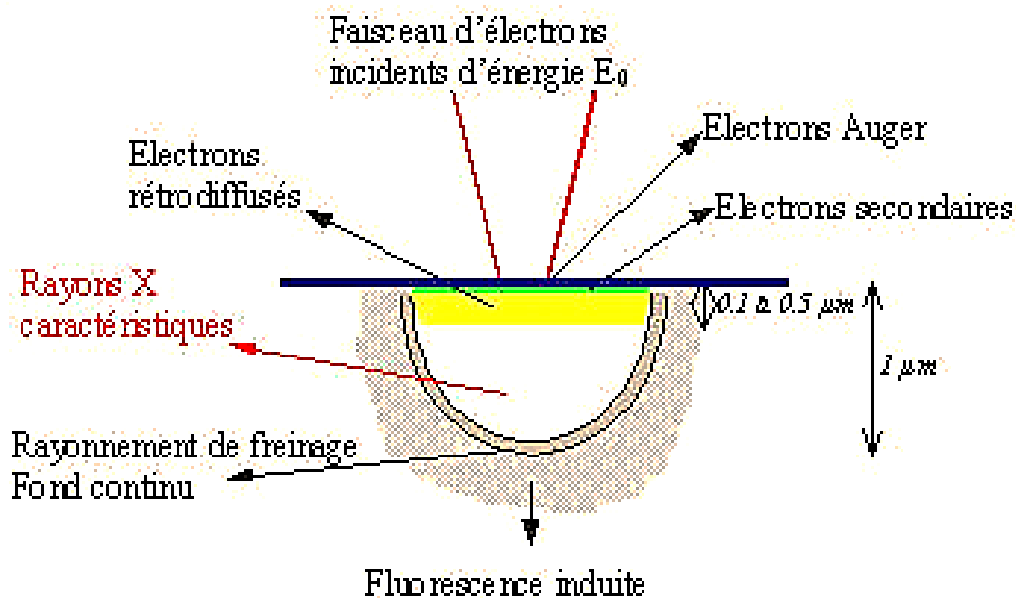


Figure I.1 : Schéma des interactions électron-matière résultant de l'impact d'un faisceau d'électrons sur un spécimen

<http://www.gm.univ-montp2.fr>

I.3.1. Diffusion élastique

Au cours d'une interaction élastique, l'électron projectile subit une diffusion coulombienne par le potentiel électrique d'un noyau de charge Ze à grande distance de cet atome et est dévié de sa trajectoire initiale sans perte d'énergie appréciable en raison de la grande différence de masses (Zouckermann, 1957). Il n'y a pas de modification de l'énergie interne de l'atome et l'énergie de l'électron après déviation (diffusion) est proche de celle

avant l'interaction et les états électroniques et nucléaires de la molécule (état rotationnel et vibrationnel) restent inchangés après la collision (Sanz et *al.*, 2014).

La probabilité de diffusion augmente en Z^2 l'absorbeur et environ avec $1/E_K^2$, où E_K représente l'énergie cinétique des électrons incidents, cette probabilité est, pour un angle de diffusion donné, d'autant plus grande que l'énergie de l'électron est faible (Ratliff, 2009).

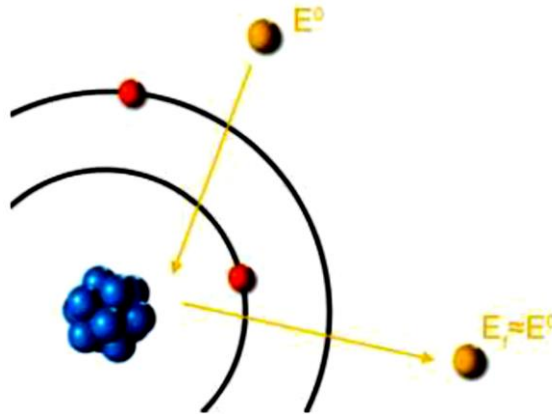


Figure I.2 : Phénomène de diffusion élastique

<http://mon ftp.a.moi.chez-alice.fr>

I.3.1.1. Électrons rétrodiffusés

Plus rare, l'électron primaire peut interagir avec le noyau atomique, qui se traduira par une forte déviation de la trajectoire incidente sans transfert important d'énergie. Ces déviations peuvent conduire l'électron primaire à ressortir de la cible, c'est l'émission rétrodiffusée. Plus le matériau a des atomes lourds, plus le nombre d'électrons rétrodiffusés augmente (Darlington et *al.*, 2007).

L'émission de ces derniers, avec une fraction de perte d'énergie généralement de 50% à 80% par rapport à l'incident, dépend de la nature du matériau bombardé et de l'énergie des électrons incidents.

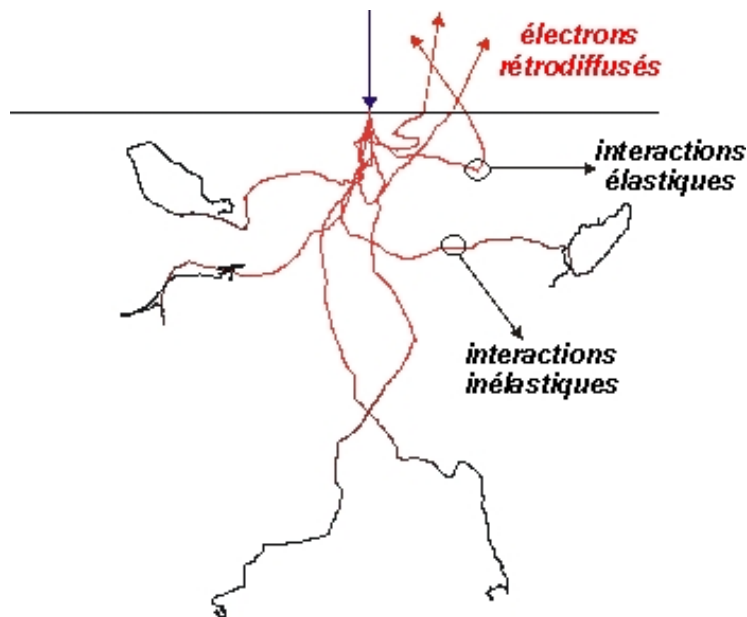


Figure I.3 : Électrons rétrodiffusés

<http://www.gn-meba.org/tutorial/interactions.htm>

I.3.2. Diffusion inélastique

Au cours de la diffusion inélastique, l'électron entrant transfère une grande partie de son énergie à la molécule cible. Ces collisions sont responsables de la plupart de l'énergie perdu par les projectiles (importance primordiale en radiobiologie).

Le transfert d'énergie maximal est de $E/2$ pour les électrons et de E pour les positrons, où E est l'énergie cinétique. Un électron peut transférer toute son énergie cinétique à un autre électron dans une collision. Après la collision, il y aura deux électrons avec différents énergies, et par convention, l'électron avec la plus grande énergie est considérée comme primaire, et donc, l'énergie maximal transféré sera de $E/2$. Pour les positrons, c'est possible de différencier les particules après la collision, et donc, l'énergie maximal transféré est E (Brahme, 2014). Ces interactions déterminent le pouvoir d'arrêt.

I.3.2.1. Ionisation et excitation

L'ionisation et l'excitation coulombienne d'atomes sont les processus dominant dans l'interaction de particules chargées avec la matière. L'électron incident transfère une partie de son énergie cinétique à l'électron atomique ; selon la valeur de la quantité d'énergie transférée, l'une ou l'autre de ces réactions aura lieu (Jimonet, 2021).

• Excitation

Si l'énergie transférée par l'électron incident est exactement égal à la différence entre les énergies de liaison de deux couches électronique de l'atome cible, un électron de cet atome saute sur une couche moins liée et il y a excitation. Les électrons atomiques concernés sont les électrons faiblement liés des couches externes (Attix, 2008).

Cet électron va chercher à retrouver son niveau énergétique de départ. Lors de son retour à sa couche originelle, de l'énergie est libérée sous la forme d'un photon dont la valeur d'énergie dépendra de la différence entre les deux niveaux énergétiques. On parle de réarrangement du cortège électronique. Ce phénomène s'observe également dans le cas d'une ionisation où il aboutit généralement à une émission en cascade de rayonnements électromagnétiques et/ou électroniques de faibles énergies (Jimonet, 2021).

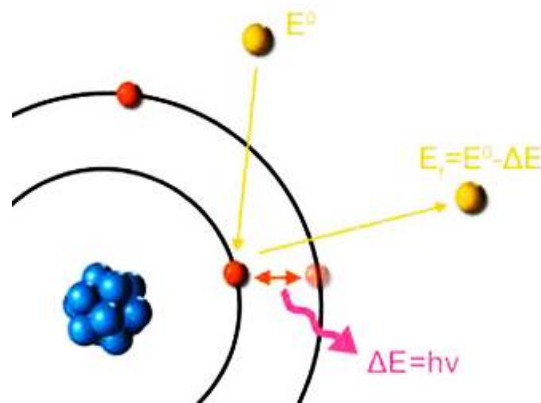


Figure I.4 : Phénomène d'excitation

<http://mon.ftp.a.moi.chez-alice.fr>

• Ionisation

Si l'énergie transférée par l'électron incident est supérieure à l'énergie de liaison ($E > 30\text{eV}$) d'un électron de l'atome cible, celui-ci est expulsé du cortège électronique et il y a ionisation de l'atome. Les électrons atomiques concernés sont les électrons fortement liés de la couche K (Platzman, 1960).

Lors d'une ionisation, l'énergie cédée par l'électron incident est généralement faible par rapport à son énergie cinétique totale. Dans le cas où l'électron incident est un négaton, il est impossible après l'interaction de le différencier de l'électron atomique expulsé. Par convention, c'est celui qui possède la plus grande énergie cinétique qui est considéré comme étant l'électron incident (Jimonet, 2021).

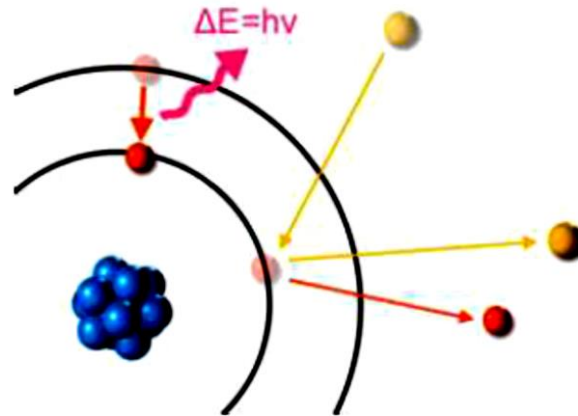


Figure I.5 : Phénomène d'ionisation

<http://mon.ftp.a.moi.chez-alice.fr>

- **Emission Auger**

L'atome peut aussi récupérer son état en éjectant un électron peu lié, appelé électron Auger.

Initialement, un électron d'une couche profonde est éjecté d'un atome, un autre électron d'une couche supérieure descend pour occuper la place vacante et ce processus de désexcitation s'accompagne de l'émission d'un photon. Cette transition électronique produit alors soit purement et simplement un photon X, en l'occurrence lié à la fluorescence X soit l'émission d'un autre électron de l'atome ayant absorbé ce photon X. C'est précisément cet électron que l'on appelle un électron Auger (Carlson et *al.*, 1965)

les électrons Auger fournissent un outil extrêmement utile pour déterminer la composition élémentaire des premières couches atomiques de la surface (Weiss et *al.*, 1988).

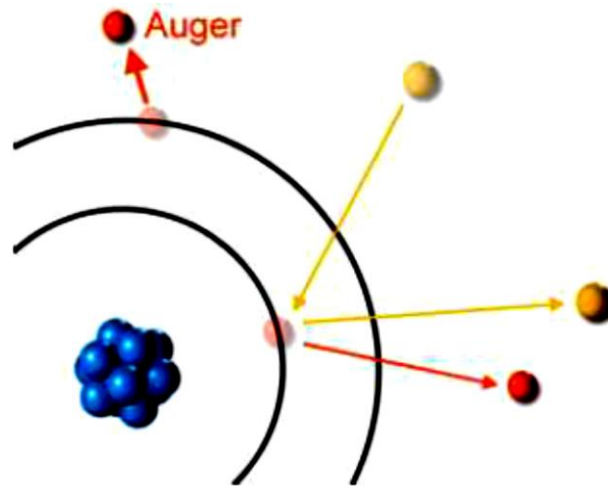


Figure I.6 : Emission Auger

<http://mon.ftp.a.moi.chez-alice.fr>

I.3.2.2. Ejection d'un électron secondaire

Lorsqu'un électron est peu lié, celui-ci peut acquérir une énergie cinétique suffisante pour être éjecté. On l'appelle alors électron secondaire. Il a une énergie plus faible que les électrons primaires (Bruining, 2016). Ces électrons subissent des interactions inélastiques dans le matériau. Si leur énergie est suffisante, certains peuvent être éjectés de la surface du matériau. Ces électrons permettent d'observer le relief en microscopie électronique à balayage (Alvarado et *al.*, 2018).

Ces électrons ont une énergie de l'ordre de 500 eV et avant de pouvoir quitter l'échantillon, ils subissent encore à une perte aléatoire d'énergie. Ce phénomène a lieu pour des distances plus proches à la surface (de 5 à 10 nm de la surface). Donc, ces électrons donnent des informations spécifiques dans la zone d'interaction avec la matière (Bruining, 2016).

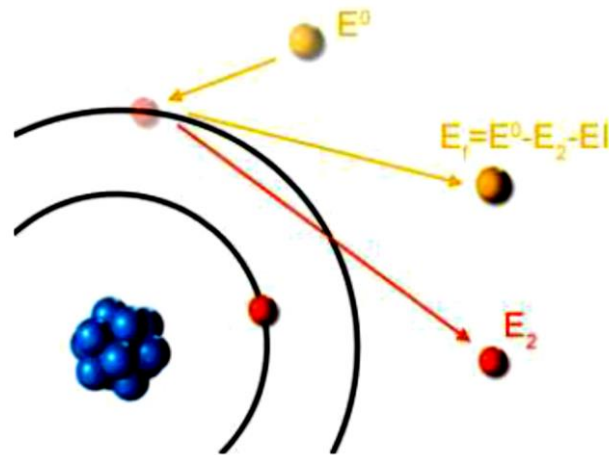


Figure I.7 : Electron secondaire

<http://mon.ftp.a.moi.chez-alice.fr>

I.3.2.3. Rayonnement de freinage : Bremsstrahlung

Cet effet concerne toute particule chargée, mais il affecte principalement celles les plus légères comme les électrons. L'électron incident est dévié dans le champ coulombien du noyau de l'atome cible et ce changement de trajectoire s'accompagne de l'émission d'un rayonnement électromagnétique (rayonnement de freinage ou de Bremsstrahlung). Ce phénomène ne concerne que les électrons de très fortes énergies (plusieurs MeV) et qui de plus traversent des milieux très denses (Turner, 2008).

La contribution relative du Bremsstrahlung au ralentissement est ainsi de l'ordre de 0.3% pour des énergies de 1 MeV pour atteindre 3% pour des énergies de 10 MeV. A plus faibles énergies, la perte d'énergie est due principalement aux interactions avec les électrons de la cible. Cependant l'électron incident ayant la même masse que les électrons atomiques avec lesquels il interagit, il est fortement défléchi (Ottini-Hustache, 2001).

Cette interaction a de nombreuses applications dont la génération de rayons X. C'est en effet un des seuls moyens de produire des photons de haute énergie, notamment pour les faisceaux de photons utilisés en radiothérapie.

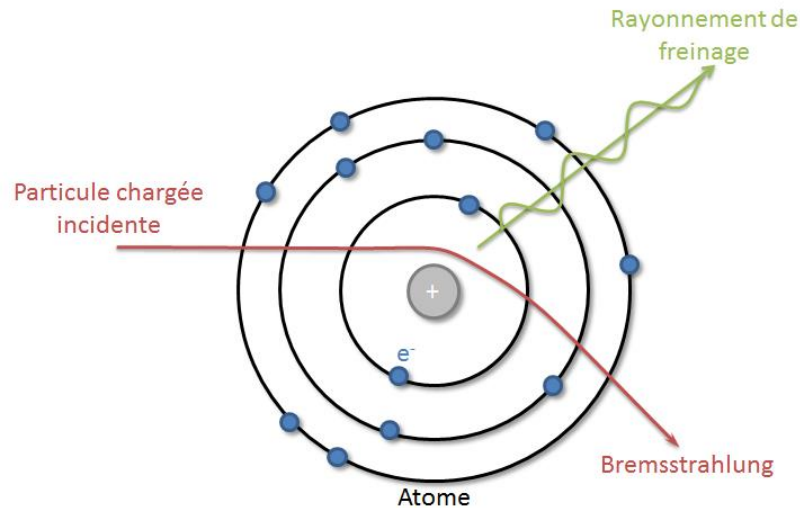


Figure I.8 : Rayonnement de freinage : Bremsstrahlung

<http://steevespaces.free.fr>

I.3.2.4. Pouvoir d'arrêt

Le ralentissement de l'électron dans la matière est exprimé à l'aide de la formule de Bethe (Bethe, 1930 ; 1934):

$$S = \left| -\frac{dE}{dl} \right| = \frac{e^4 z^2 Z N}{4\pi\epsilon_0 m_0 v^2} \left(\ln \left(\frac{2m_0 v^2}{I} \right) - \ln \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) - \frac{v^2}{c^2} \right)$$

m_0, e : masse au repos et charge de l'électron, respectivement,

v, z : vitesse et charge de la particule, respectivement,

N, Z : densité et numéro atomique des atomes du milieu, respectivement,

I : constante caractéristique de l'espèce atomique considérée, définie comme une énergie moyenne d'excitation et d'ionisation des atomes du milieu.

I.4. Interactions des positrons

Les positrons (e^+) sont les antiparticules des électrons, c'est-à-dire qu'ils ont la même masse ($m = 9,1 \times 10^{-31}$ kg) et spin ($s = 1/2$) que les électrons, mais leur charge électrique est positive plutôt que négative ($q = + 1,6 \times 10^{-19}$ C). Le positron a d'abord été théoriquement prédit par Dirac, et observé expérimentalement quelques années plus tard par Anderson (Anderson, 1933).

Malgré les propriétés physiques communes des électrons et des positrons, les interactions positron-molécule sont très différentes des interactions électron-molécule dues à la charge opposée des projectiles. La différence la plus significative est le fait que le positron incident se distingue des électrons de la molécule cible (Hendee et *al.*, 2002).

Une particularité importante apparaît cependant dans le cas des positons lorsqu'ils ont perdu la totalité de leur énergie cinétique (Jimonet, 2021).

Ainsi, les effets d'échange électron-électron, qui sont présents dans les collisions électron-molécule, ne se produisent pas dans les interactions positrons. En outre, contrairement aux électrons, le positron est attiré par les électrons cibles et repoussé par les noyaux moléculaires. Cela signifie que l'interaction statique entre le positron et la cible est répulsive, alors que pour les électrons, elle est attirante (Sanz, 2014).

En ce qui concerne les effets de polarisation, ils présentent normalement une dépendance quadratique par rapport aux champs appliqués, étant donc indépendants du signe de charge du projectile. Par conséquent, la section efficace totale pour une interaction positron-molécule donnée est typiquement plus petite que l'interaction électronique correspondante à basse énergie (Sanz, 2014).

I.5. Phénomène d'annihilation

Au repos, le positon s'associe à un électron négatif et ces deux particules se dématérialisent. Ce phénomène d'annihilation de la matière s'accompagne de l'émission de deux rayonnements électromagnétiques (Ottini-Hustache, 2001).

Les lois générales de la conservation de l'énergie et de l'impulsion appliquées à l'annihilation montrent que ces deux rayonnements X d'énergie 511 keV sont émis dans des directions opposées (angle de 180°) (Jimonet et *al.*, 2007 ; Ottini-Hustache, 2001).

Tout écran utilisé pour absorber des positons (β^+) devient donc une source secondaire de rayonnements X monoénergétiques (511 keV) dont le nombre est deux fois plus important que celui des positons absorbés. Dans une optique de radioprotection, il conviendra de tenir compte de ce phénomène (Hendee et *al.*, 2002).

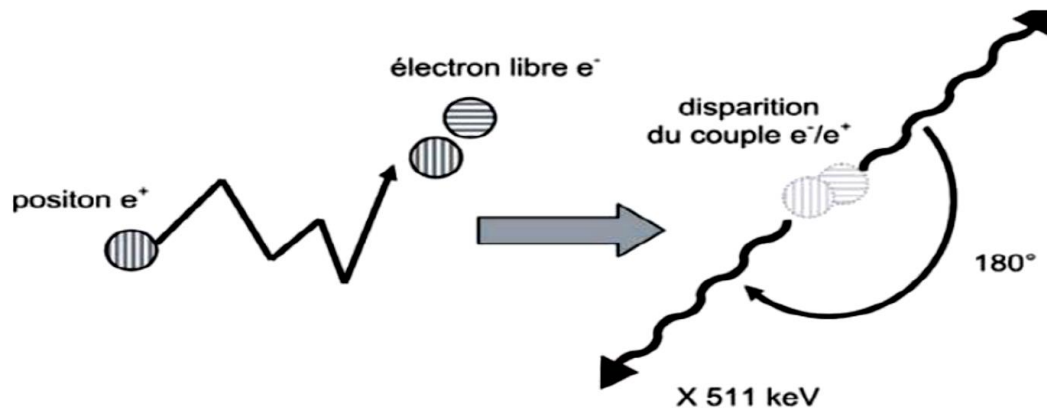


Figure I.9 : Phénomène d'annihilation de la matière (Jimonet et al., 2007).

Chapitre II

Pyrimidine précurseur des bases pyrimidiques

II.1. Introduction

L'ADN est la molécule qui est le support de l'information génétique des êtres vivants. Elle doit donc être transmise de cellule en cellule à chaque cycle cellulaire.

L'ADN est une macromolécule, une molécule de très grande taille, constituée de milliards d'atomes. C'est également ce qu'on appelle un polymère, une grande molécule constituée de nombreuses petites molécules assemblées de façon répétitive, monomères. Dans le cas de l'ADN, ses monomères sont appelés les nucléotides.

L'ADN est un composant essentiel dans les cellules vivantes, il porte l'information génétique et détermine la structure et les fonctions particulières de chaque cellule. Au XIX^e siècle, Miescher découvre une substance chimique amorphe phosphatée dans les noyaux cellulaires alors que Mendel décrit les « facteurs invisibles » de l'hérédité et que Flemming individualise la « chromatine » au microscope. En 1952 Franklin découvre le spectre de diffraction rayons X de la molécule d'ADN, qui inspire à Watson et Crick le modèle en double hélice à brins complémentaires antiparallèles (Bruch - Eloit et al., 2019) Watson et Crick ont résolu la structure tridimensionnelle de l'ADN en 1953 (Heather et Chain., 2016).

II.2. Structure de l'ADN

La molécule d'ADN est une double hélice composée de deux brins enroulés l'un autour de l'autre. Chaque brin est composé d'une succession de nucléotides qui sont un assemblage de trois molécules : un groupement phosphate, un sucre (désoxyribose) et une base azotée. Chacune de ces chaînes est constituée d'un enchaînement de bases dites puriques (guanine, G ; adénine, A) et pyrimidiques (cytosine, C ; thymine, T). Les bases adénine-thymine (A/T) et cytosine-guanine (C/G) sont complémentaires et cette association est assurée respectivement par deux et trois liaisons hydrogène (Fréneau. 2018).

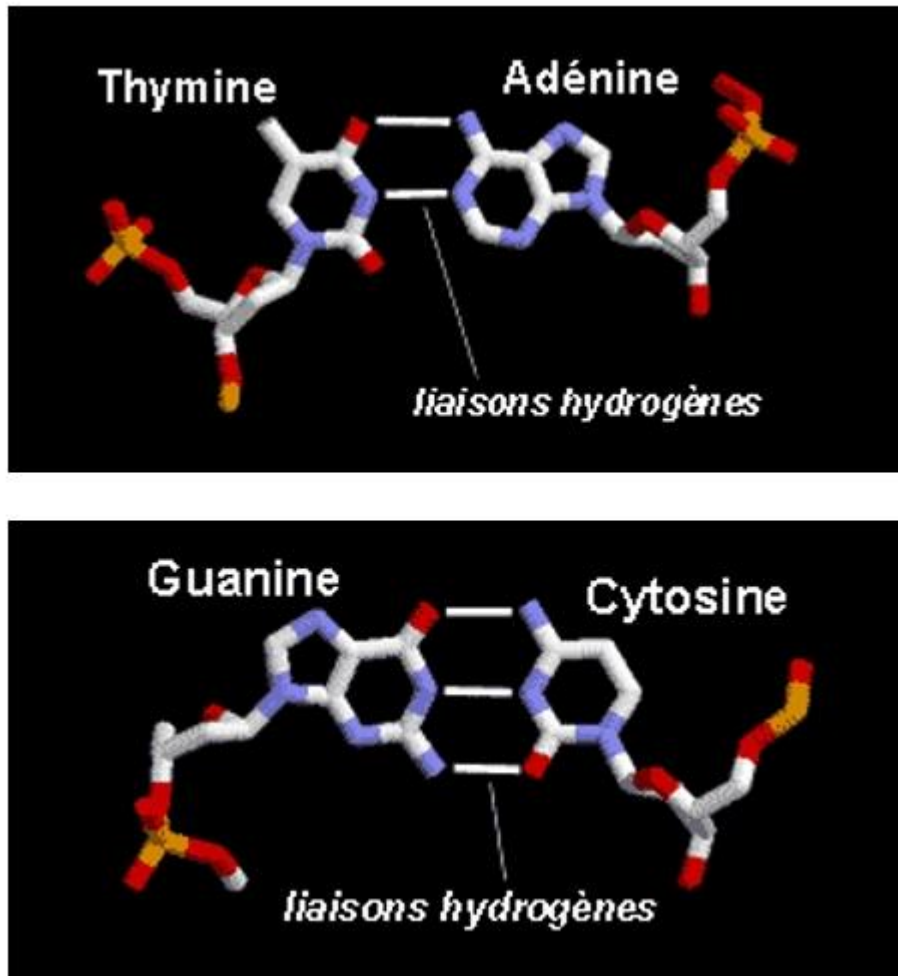


Figure II.1 : Les bases azotées peuvent s'associer deux à deux par des liaisons hydrogènes.

<https://planet-vie.ens.fr/thematiques/cellules-et-molecules/molecules/la-decouverte-de-la-structure-de-l-adn>

De plus, certains rapports entre les nucléotides formant l'ADN avaient été observés. Ces rapports sont connus sous le nom de règles de Chargaff, du nom du chercheur qui les a décrits. Toutefois, la raison d'être de ces rapports restait inconnue...

$$\frac{A + G}{T + C} = 1 \quad \frac{A}{T} = \frac{G}{C} = 1$$

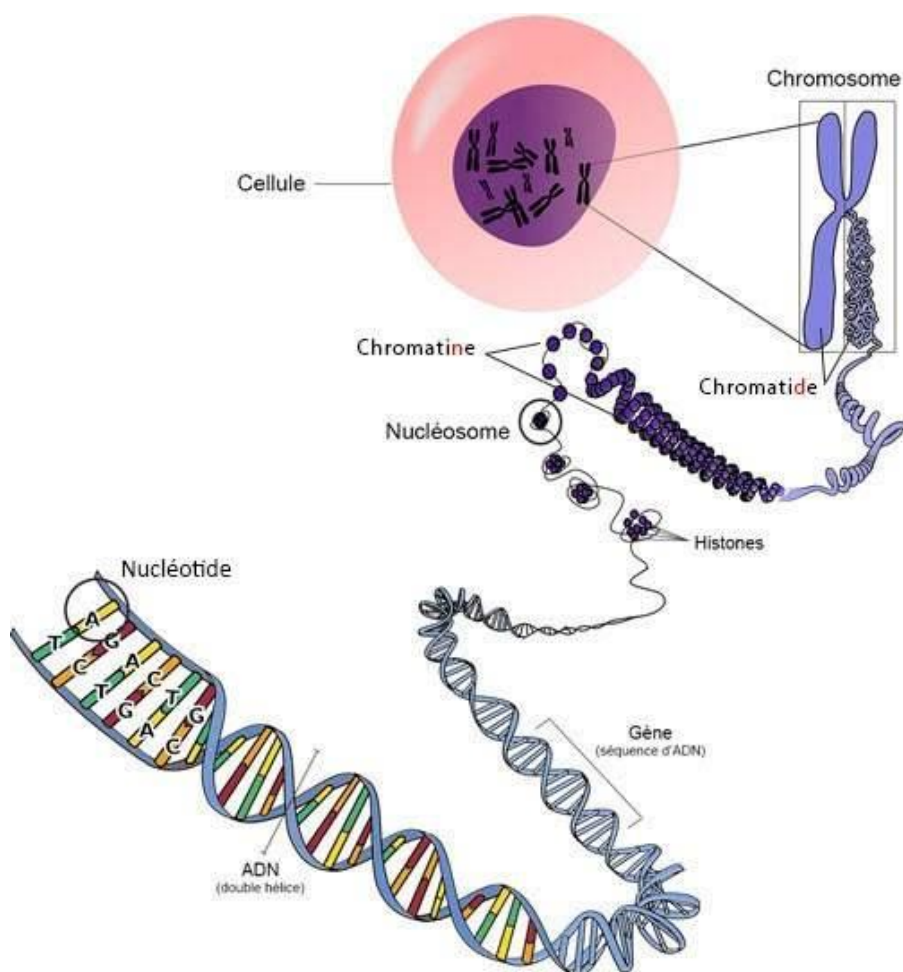


Figure II.2 : De l'ADN à la cellule

http://georges.dolisi.free.fr/Transmission_vie/2_cycle_cellule.htm

II.3. Composants de l'ADN

II.3. 1. Nucléotides

Un nucléotide (figure 3) est composé de trois molécules plus petites, un phosphate, un sucre désoxyribose et une base azotée qui donne son nom au nucléotide. Les 4 bases azotées sont thymine (pour le nucléotide T), cytosine (pour C), guanine (pour G) et adénine (pour A). Les nucléotides polymérisés sont unis les uns aux autres par des liaisons covalentes entre le désoxyribose d'un nucléotide et le groupe phosphate du nucléotide, formant ainsi une chaîne où alternent oses et phosphates, avec des bases nucléiques liées chacune à un ose (Aouina, 2020)

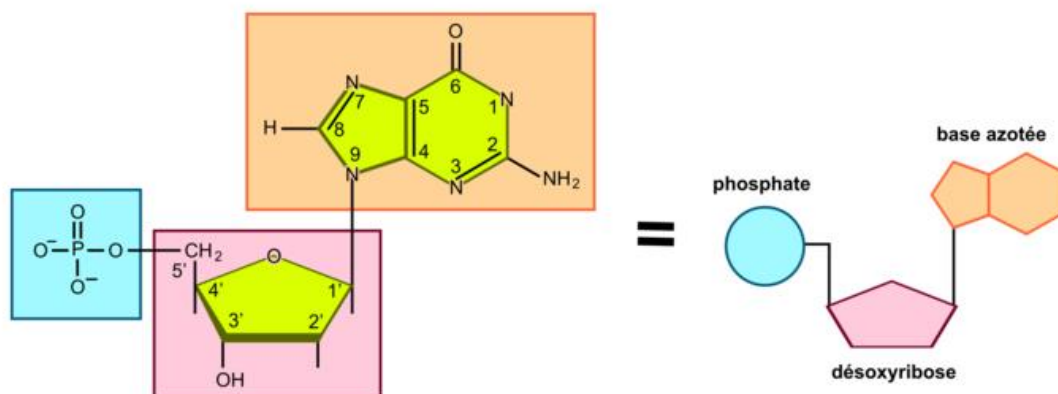


Figure II.3 : Structures d'un nucléotide

<https://www.assistancescolaire.com>

II.3. 1.1. Désoxyribose

Un désoxyribose est un sucre à 5 carbones contenu dans les nucléotides de l'ADN, dérivé d'un monosaccharide à cinq atomes de carbone (pentose, formule empirique $C_5H_{10}O_4$), dérivé du ribose par perte d'un atome d'oxygène dans l'hydroxyle 2', et ne répond donc pas à la formule générale des monosaccharides $(CH_2O)_n$. Cela fait partie de l'ADN. C'est un solide cristallin et incolore, assez soluble dans l'eau. Dans sa forme furanose (cycle pentagonal), il fait partie des nucléotides qui constituent les chaînes de l'acide désoxyribonucléique (ADN) (Victor, 2012).

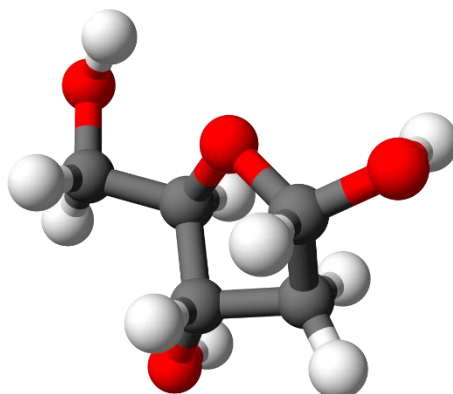


Figure II.4 : Structures d'un désoxyribose

<https://commons.wikimedia.org>

II.3.1.2. Groupement phosphate

Le groupe phosphate. Il se fixe aux sucres (désoxyribose) à deux endroits : 1°) en position 5' sur le sucre « en dessous », le CH₂ joue le rôle du radical R ci-dessous; 2°) en position 3' sur le sucre « au-dessus », par l'intermédiaire de l'atome O (Frelin, 2011).

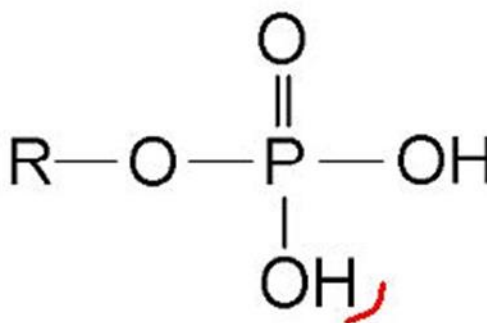


Figure II.5 : Structures d'un désoxyribose

<https://commons.wikimedia.org>

II.3.1.3. Bases azotées

Les paires de base sont au nombre de quatre : Adénine (notée A), Guanine (G), Cytosine (C) et Thymine (T). On distingue les paires de base en deux catégories suivant qu'elles dérivent de la purine (A et G) ou de la pyrimidine (T et C). Ces bases peuvent s'apparier spécifiquement par des liaisons hydrogènes. A s'associe avec T, et G avec C (Heim, T. 2002)

II.4. La pyrimidine

La pyrimidine (C₄H₄N₂) est un composé organique aromatique hétérocyclique contenant deux atomes d'azote aux positions 1 et 3 du cycle à six membres (Figure 6) et est considérée comme une molécule modèle pour les études des interactions des électrons avec l'ADN et Bases ARN en raison de la similitude de sa structure cyclique avec trois des cinq nucléobases, à savoir la cytosine (C₄H₅N₃O), la thymine (C₅H₆N₂O₂) et l'uracile (C₄H₄N₂O₂). (Palihawadana,P-Sullivan,J et al., 2011)

Thymine (T) : la thymine (C₅H₆N₂O₂), schématisée par la figure 1-3-b, présente pratiquement la même structure du cycle aromatique de l'uracile composée de quatre atomes de carbone et deux atomes d'azote. Chacun de ces atomes est lié à un atome d'hydrogène à l'exception du cas des deux atomes de carbone 2 et 4 qui sont liés chacun à

un atome d'oxygène par une double liaison et celui du carbone 5 lié avec un groupement méthyl, CH₃. Ce qui fait que la masse molaire de la thymine est 126 uma. Elle peut être aussi appelée 5- méthyluracile (Tabet, 2007).

Dans le cas de la cytosine (C₄H₅N₃O), la liaison double de l'atome d'oxygène (16 uma) avec l'atome de carbone 4 est remplacée par une liaison simple avec le groupe amine NH₂ de même masse molaire. L'atome de carbone 4 effectue ainsi une liaison double avec l'atome d'azote qui ne possède pas cette fois une liaison simple avec un atome d'hydrogène. La cytosine est d'une masse molaire de 111 uma (Tabet, 2007).

La pyrimidine possède également des propriétés physico-chimiques intéressantes qui en font une molécule intéressante à étudier d'un point de vue fondamental. Ceux-ci incluent une polarisabilité dipolaire et un moment dipolaire relativement importants, et un nuage de charge électronique avec une extension spatiale significative (Palihawadana, et *al.*, 2011)

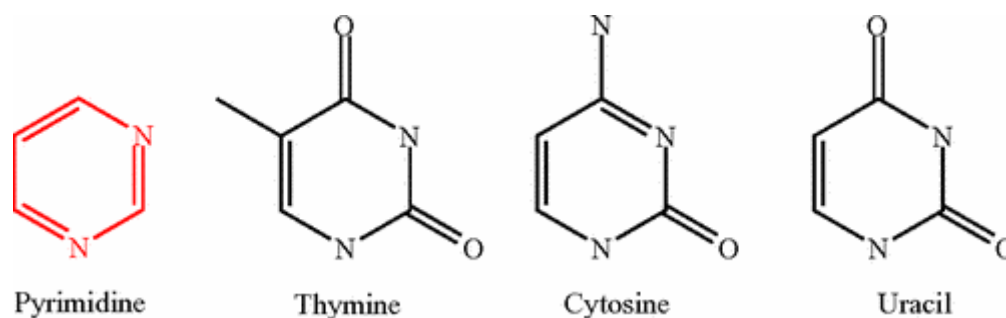


Figure II.6: Diagramme schématisant la structure de la pyrimidine et des bases pyrimidiques (Palihawadana et *al.*, 2011)

II.5. Radiolyse de l'eau entourant l'ADN

Si de nombreux composés biologiques sont sensibles à la radiolyse, l'ADN est une cible cellulaire critique des radiations ionisantes. Les rayonnements de faible TEL, tels que les rayons γ , agissent sur l'ADN en solution aqueuse diluée essentiellement par effet indirect, c'est-à-dire par l'intermédiaire des radicaux libres provenant de la radiolyse de l'eau. (Gillard, 2005). On parle d'effets directs lorsque l'énergie est déposée directement sur la molécule d'ADN en libérant un électron secondaire (Wozny, 2018). Cet effet peut se produire par interaction directe avec les constituants de l'ADN (désoxyribose, base et phosphate) ou par rupture des liaisons de la molécule d'ADN induisant une cascade d'événements biologiques délétères (Wozny, 2018).

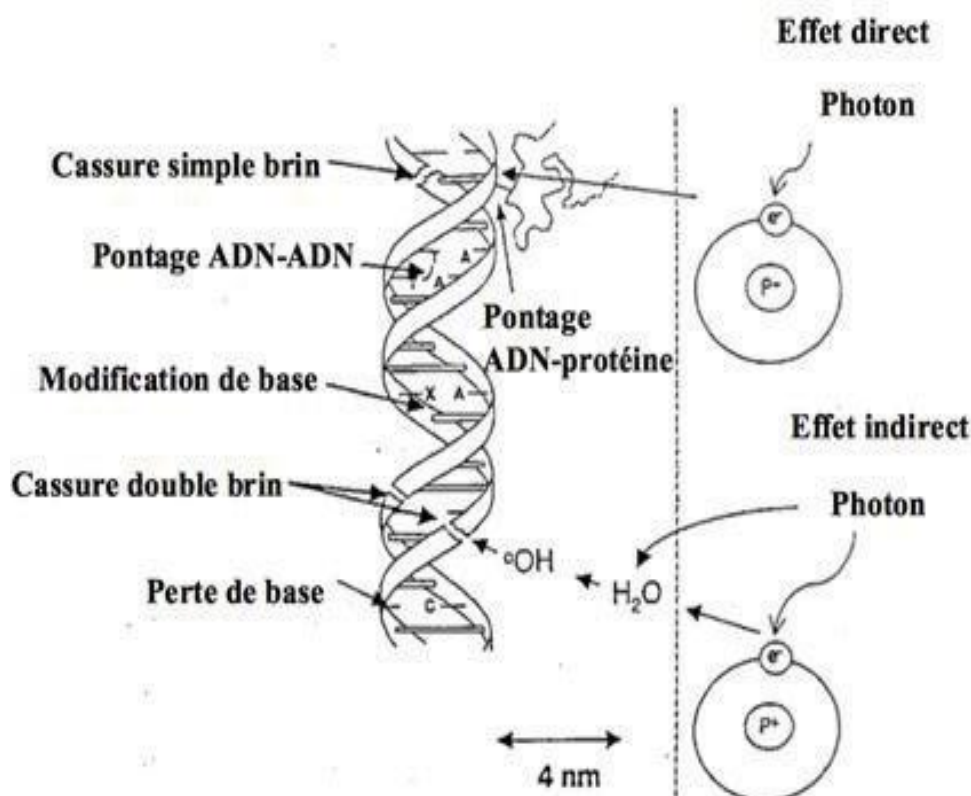


Figure II.7: Représentation schématique des principaux dommages de l'ADN produits par des effets directs et indirects (Wozny, 2018)

II.6. Lésions fréquentes de l'ADN

Cinq grands types de modifications qui résultent de ces deux principaux mécanismes ont été identifiés : les cassures de chaînes d'ADN, les modifications de la structure chimique. Effet direct Photon Effet indirect Photon Pontage ADN-protéine Cassure simple brin Pontage ADN-ADN Modification de base Cassure double brin Perte de base des bases puriques et pyrimidiques, la création de sites abasiques, la formation de pontages ADN-protéines, la formation d'adduits (Chetioui et *al.*, 2004).

Toutes les molécules constitutives d'une cellule sont des cibles potentielles: eau, acides nucléiques (ADN), protéines, lipides, carbohydrates. En raison de la fonction centrale de l'ADN dans la cellule, les lésions de l'ADN ont été les plus étudiées (Chetioui et *al.*, 2004).

La plupart des ruptures simples chaînes de l'ADN (CSB) radio-induits sont produits par les radicaux qui attaquent la liaison base-désoxyribose (Lemouari et *al.*, 2020).

Dans la majorité des cas, la cassure double-brin ou la rupture des deux chaînes d'ADN à des sites distants de quelques nucléotides est formée par les radicaux produits lors du dépôt d'énergie par une particule (Lemouari et *al.*, 2020). Si deux cassures proches affectent le même brin, il se produira une perte d'un morceau de la chaîne (Chetioui et *al.*, 2004).

Les bases puriques et pyrimidiques modifiées constituent l'une des principales classes de dommages à l'ADN médiés par les radicaux hydroxyle avec les ruptures de brins oligonucléotidiques, les liaisons croisées ADN-protéines et les sites abasiques (Cadet et *al.*, 1999).

Chapitre III

Matériels et méthodes

III.1. Introduction

Après avoir pris connaissance des modèles de molécules qui composent l'ADN (chapitre II) dans ce chapitre l'étude de l'interaction, cas de diffusion élastique, des électrons avec une molécule non moins importante que le reste des composants de l'ADN, la molécule de la pyrimidine.

Ainsi, afin de contrôler les collisions élastiques des électrons avec le précurseur des bases pyrimidiques, elles sont connues physiquement (par des équations), sections efficaces; en dedans modèle de calcul la section efficace total. Sections efficaces des collisions élastiques des électrons avec des atomes où on a utilisé le système de code FORTRAN 77 ELSEPA et les sections efficace élastiques en cas de collisions avec les molécules où on a utilisé la méthodes SCAR.

III.2. Calcul de sections efficaces élastiques

Les sections efficaces de collision d'électrons dépendent de l'énergie d'impact E et des angles de diffusion θ et ϕ . La section efficace différentielle (par unité d'angle solide) pour la diffusion élastique d'un projectile d'énergie cinétique E dans l'élément d'angle solide est définie comme (Walker, 1971 ; Drake et *al.*, 2006) :

$$\frac{d\sigma_n(E_0, \Omega)}{d\Omega} = \frac{k_f}{k_i} |f_n(E_0, \Omega)|^2 \quad (1)$$

Avec Ω est l'angle polaire de détection, k_i et k_f sont les moments initial et final, et f_n est l'amplitude de diffusion complexe ($n=0$ se réfère à la diffusion élastique).

L'intégration sur tous les angles de diffusion donne les sections efficaces intégrales (Drake et *al.*, 2006) :

$$\sigma_n(E_0) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{d\sigma_n(E_0, \Omega)}{d\Omega} \sin\theta d\theta d\phi \quad (2)$$

Dans le cas de la diffusion élastique, la section efficace de transfert d'impulsion est définie comme suit (Drake et *al.*, 2006) :

$$\sigma_0^M(E_0) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{d\sigma_n(E_0, \Omega)}{d\Omega} (1 - \cos\theta) \sin\theta d\theta d\phi \quad (3)$$

La section efficace totale de diffusion des électrons est obtenue en faisant la somme de toutes les sections efficaces intégrales (Drake *et al.*, 2006 ; Mayol et Salvat, 1997)

$$\sigma_{tot}(E_0) = \sum_n \sigma_n(E_0) \quad (4)$$

III.3. Calcul des sections efficaces des atomes

Les sections efficaces de diffusion élastique sont obtenues à partir du code ELSEPA.

Le système de code FORTRAN 77 ELSEPA est conçu pour le calcul de la diffusion élastique des électrons et des positrons par les atomes et les ions positifs. Ces codes effectuent des calculs d'ondes partielles relativistes (Dirac) pour la diffusion par un potentiel d'interaction central local $V(r)$. Pour les atomes et les ions, l'approximation du champ statique est adoptée, le potentiel défini étant égal à l'énergie d'interaction électrostatique entre le projectile et la cible, plus une interaction d'échange local approximatif lorsque le projectile est un électron (Salvat *et al.*, 2005).

Pour les projectiles ayant des énergies cinétiques allant jusqu'à 10 keV, le potentiel peut éventuellement inclure un potentiel de corrélation-polarisation semi-empirique pour décrire l'effet de polarisation de la charge cible. De plus, pour les projectiles d'énergies inférieures à 1 MeV, un potentiel d'absorption imaginaire peut être introduit (Salvat *et al.*, 2005)

Le potentiel de diffusion considéré dans le code ELSEPA a la forme générale :

$$V(r) = V_{st}(r) + V_{ex}(r) + V_{cp}(r) + iW_{abs}(r) \quad (5)$$

où $V_{st}(r)$ est le potentiel électrostatique, $V_{ex}(r)$ est le potentiel d'échange local (uniquement dans le cas de la diffusion d'électrons), $V_{cp}(r)$ est le potentiel de corrélation-polarisation et $W_{abs}(r)$ est le potentiel d'absorption. Le code ELSEPA offre le choix de différents modèles pour les contributions de $V_{st}(r)$, $V_{ex}(r)$, $V_{cp}(r)$ et $W_{abs}(r)$ dans le potentiel total (Salvat *et al.*, 2005). Le potentiel $V_{st}(r)$ comprend l'interaction électrostatique des projectiles avec la distribution de charge positive du noyau et la distribution de charge négative des électrons atomiques (Jablonski *et al.*, 2005).

La partie réelle représente la diffusion élastique des électrons ou des positrons incidents tandis que la partie imaginaire représente les processus inélastiques considérés comme "absorption" du faisceau incident (Salvat 2003). Lorsqu'on considère les collisions élastiques d'électrons et de positrons à partir d'atomes libres, la partie réelle du potentiel d'interaction est utilisée comme

$$\begin{cases} V(r) = V_{st}(r) + V_{cp}(r) + V_{ex}(r) & \text{pour les électrons} \\ V(r) = -V_{st}(r) + V_{cp}(r) & \text{pour les positrons} \end{cases} \quad (6)$$

Pour la diffusion d'électrons, le potentiel est représenté par la somme du potentiel d'interaction électrostatique $V_{st}(r)$ dérivé d'un calcul de Hartree-Fock de la distribution de charge atomique (Salvat 2003 ; Salvat et *al.*, 2005), le potentiel d'échange $V_{ex}(r)$ (utilisé uniquement pour les électrons) (Salvat 2003) pour expliquer l'indiscernabilité des électrons incidents (Salvat et *al.*, 2005), $V_{cp}(r)$ le potentiel de corrélation-polarisation (nécessaire uniquement pour les projectiles lents, avec des énergies incidentes E inférieures à environ 10 keV) (Salvat, 2003).

Le potentiel d'interaction électrostatique $V_{st}(r)$ du projectile à une distance r du noyau de l'atome cible est donné par (Salvat 2003 ; Salvat et *al.*, 2005) ;

$$V_{st}(r) \equiv \frac{Z_0 Z e^2}{r} - Z_0 e^2 \left(\frac{1}{r} \int_0^r \rho(r') 4\pi r'^2 dr' + \int_r^\infty \rho(r') 4\pi r' dr' \right) \quad (7)$$

où $Z_0 e$ est la charge du projectile.

Le potentiel d'échange de Furness et McCarthy qui est dérivé directement de l'expression formelle de l'interaction d'échange non locale (Salvat 2003) est considéré pour le cas des électrons comme ;

$$V_{ex}(r) = \frac{1}{2} [E - V_{st}(r)] - \frac{1}{2} \{ [E - V_{st}(r)]^2 + 4\pi a_0 e^4 \rho(r) \}^{1/2} \quad (8)$$

Lorsque le projectile est loin de l'atome, l'énergie potentielle de polarisation peut être approchée au moyen du potentiel de Buckingham qui est également valable pour les positrons

$$V_{cp}(r) = - \frac{\alpha_d e^2}{2(r^2 + d^2)^2} \quad (9)$$

où α_d est la polarisabilité dipolaire de l'atome cible et d est un paramètre de coupure phénoménologique qui sert à empêcher le potentiel de polarisation de diverger en $r = 0$ (Salvat 2003);

$$d^4 = \frac{1}{2} \alpha_d a_0 Z^{-1/3} b_{pol}^2 \quad (10)$$

où b_{pol} en tant que paramètre réglable dépendant de l'énergie (Salvat et *al.*, 2005).

$$b_{pol}^2 = \max\{(E - 50\text{eV})/(16 \text{ eV}), 1\} \quad (11)$$

La section efficace totale pour un atome i est donnée par (Walker, 1971) ;

$$\frac{d\sigma_i^{el}}{d\theta} = |F_l(\theta)|^2 + |G_l(\theta)|^2 \quad (12)$$

Où

$$F_l = \frac{1}{2iK} \{(l+1)[\exp(2i\delta_{l+}) - 1] + l[\exp(-2i\delta_{l-}) - 1]\} P_l(\cos\theta) \quad (13)$$

$$G_l = \frac{1}{2iK} \{\exp(-2i\delta_{l-}) - \exp(-2i\delta_{l+})\} P_l^1(\cos\theta) \quad (14)$$

et δ_{l-} , δ_{l+} sont les déphasages d'ordre l . k représente l'impulsion du projectile qui est liée à son énergie cinétique E à travers (Salvat 2003, Salvat et *al.*, 2005, Shimizu et Ding, 1992)

$$k^2 = E(E + 2c^2)/c^2 \quad (15)$$

où c 'est la vitesse de la lumière dans le vide. Pour chaque valeur du moment angulaire orbital l (sauf $l = 0$) (Salvat et *al.*, 2005)

La section efficace totale pour un atome i est ensuite calculée à partir de la section efficace différentielle comme (Aouina et Chaoui, 2018a ; 2018b)

$$\sigma_i^{el} = \int_0^\pi \frac{d\sigma_i^{el}}{d\theta} d\Omega \quad (16)$$

III.4. La méthode des règles d'additivité avec correction d'écran (SCAR)

Pour calculer les sections efficaces élastiques totales pour la diffusion des électrons de tous les composants de la molécule d'ADN, nous avons appliqué une procédure des règles d'additivité avec correction d'écran (SCAR) (une forme corrigée de la méthode de l'atome indépendant) qui incorpore une correction géométrique pour chaque atome du reste de la molécule. Seules les coordonnées spatiales atomiques sont nécessaires pour le calcul des sections efficaces élastiques totales des différents composants des molécules d'ADN (Aouina, 2020), sans tenir compte de la symétrie moléculaire et une fois les sections efficaces connues, les quantités moléculaires corrigées sont directement évaluées (Blanco et Garcia, 2004, 2007)

La règle d'additivité pour une molécule composée de N atomes conduit à la section efficace total donné comme (Aouina et Chaoui, 2018a ; 2018b);

$$\sigma^{el} = \sigma_1^{el} + \sigma_2^{el} + \dots + \sigma_N^{el} = \sum_{i=1,N} \sigma_i^{el} \quad (17)$$

où σ^{el} est la section efficace élastique totale des atomes de la molécule.

L'introduction de coefficients d'écran s_i à la règle d'additivité conduit à (Aouina et Chaoui, 2018a ; 2018b)

$$\sigma^{el} = s_1\sigma_1^{el} + s_2\sigma_2^{el} + \dots + s_N\sigma_N^{el} = \sum_{i=1,N} s_i\sigma_i^{el} \quad (18)$$

Les coefficients de correction d'écran $0 \leq s_i \leq 1$ réduisent la contribution de chaque atome à la section efficace totale. Le calcul des coefficients s_i nécessite seulement des données sur la position et la section totale de chaque atome dans la molécule (Blanco et Garcia, 2004, 2007, 2009 ; Blanco et *al.*, 2013). Pour une énergie incidente de l'électron ou du positron, les coefficients de sélection s_i sont calculés en premier lieu. Les expressions explicites sont données comme (Aouina et Chaoui, 2018a ; 2018b)

$$s_i = \sum \pm \frac{\varepsilon_i^{(N)}}{N!} \quad (19)$$

Où

$$\varepsilon_i^{(k)} = \frac{N - k + 1}{N - 1} \sum_{j(\neq i)} \frac{\sigma_i^{el} \varepsilon_j^{(k-1)}}{\alpha_{ij}} \quad (k = 2, \dots, N) ; \quad \varepsilon_i^{(1)} = 1 \quad (20)$$

L'indice j parcourt tous les atomes N sauf l'atome i,

$$\alpha_{ij} = \max(4\pi r_{ij}^2, \sigma_i^{el}, \sigma_j^{el}) \quad (21)$$

où r_{ij} est la distance entre les centres des atomes i et j . La contribution des coefficients dans l'évaluation de la section efficace élastique peut être interprétée comme l'effet de la configuration géométrique des atomes dans la molécule avec leurs sections efficaces correspondantes considérées comme des surfaces par la particule chargée incidente qui peut se chevaucher selon la distance entre les centres des atomes. Puisque tous les atomes contribuent en fonction de leurs sections efficaces et de leurs positions à l'intérieur de la molécule, chaque coefficient de correction d'écran s_i utilisé dans chaque terme $s_i\sigma_i^{el}$ représente une moyenne des contributions de tous les atomes (en exclusion de l'atome i) dans la collision élastique.

III.5. Libre parcours moyen élastique des électrons

Le libre parcours moyen des électrons de basse énergie est un facteur important dans de nombreuses techniques d'analyse de surface. La relation entre le libre parcours moyen des électrons et leur énergie revêt une importance particulière, en particulier pour établir des facteurs élémentaires pour des applications quantitatives et pour utiliser l'émission angulaire pour obtenir des informations sur la profondeur des constituants (Aouina, 2020). Le libre parcours moyen, entre deux événements de diffusion peut être simplement dérivé de la section efficace de diffusion totale.

Le libre parcours moyen élastique des électrons et le libre parcours moyen élastique du transport sont calculés comme suit :

$$\lambda^{el} = \frac{1}{n\sigma^{el}} \quad (22)$$

Avec σ^{el} est dérivé des équations (17) et (18) respectivement ; n représente le nombre de biomolécules par Å^3 et les sections efficaces sont en Å^2 .

Chapitre IV

Résultats et discussions

IV. Résultats et discussions

IV.1. Sections efficaces élastiques

Après avoir calculé les sections efficaces des collisions élastiques avec les biomolécules, nous représentons les courbes graphiques des changements de section efficaces en termes d'énergies des électrons sortants.

Les différents ensembles de données résultant de l'inclusion de différents potentiels d'interaction mais dans notre modèle l'effet de potentiel de polarisation est omis car son effet est très prononcé pour des énergies supérieures à 1 KeV. Dans la suite des résultats, on va considérer le potentiel statique et le potentiel d'échange sans potentiel de polarisation comme le montre la figure1.

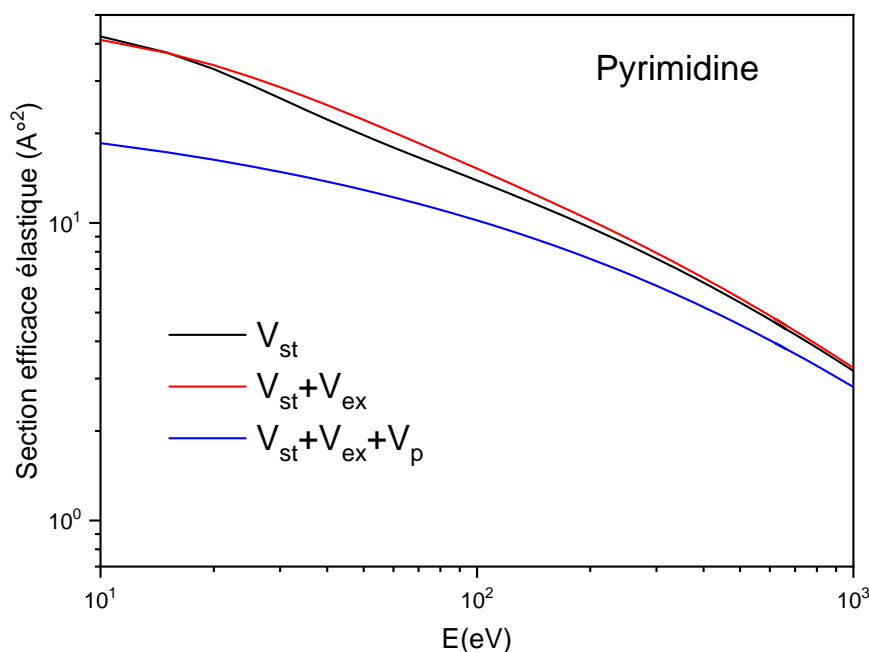


Figure IV.1. Sections efficaces élastiques des électrons de l'adénine pour différents potentiels d'interaction

La figure montre une grande divergence entre les différents potentiels. La section efficace comprenant le potentiel de polarisation est supérieure à celle qui comprend le potentiel d'échange. Des effets similaires ont été observés dans le cas de la cytosine et thymine. Dans

notre modèle théorique, les excitations rotationnelles et la correction dipolaire ne sont pas prises en compte.

La pyrimidine est un précurseur des bases pyrimidiques qui sont la cytosine et la thymine constituant la molécule d'ADN. Dans un sens plus large, ses dérivés à bases pyrimidiques sont appelés pyrimidines. Pour cette raison on va comparer les sections efficaces de collisions d'électrons avec la pyrimidine précurseur des bases nucléiques pyrimidiques avec les sections efficaces de collisions d'électrons avec la cytosine et la thymine comme le montre la figure 2.

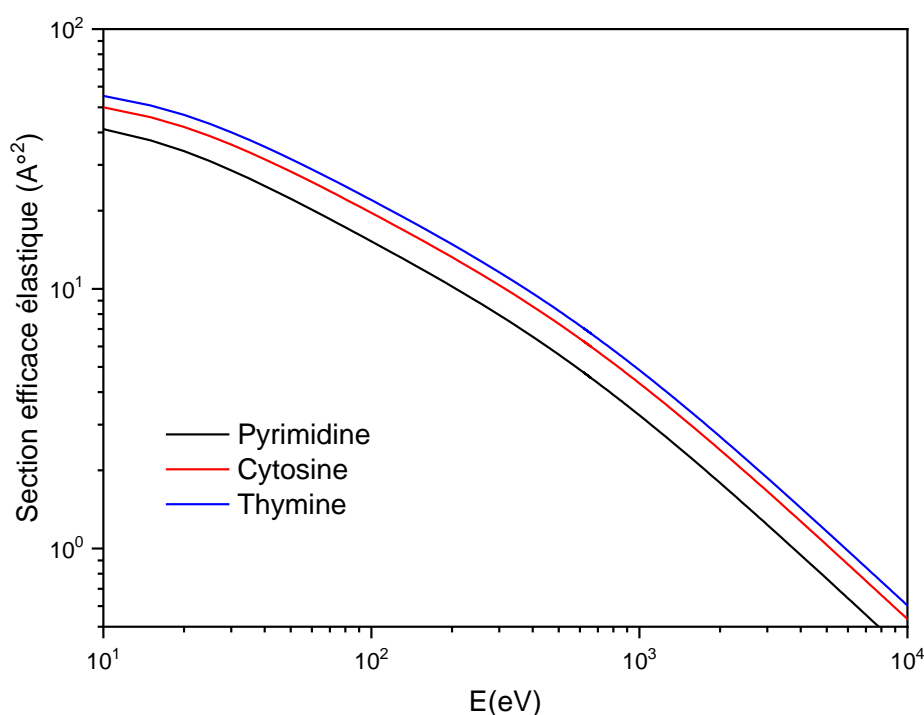


Figure IV.2. Sections efficaces élastiques des électrons de la pyrimidine comparée avec les sections efficaces élastiques des électrons de la cytosine et la thymine.

La figure montre un comportement similaire des sections efficaces des collisions élastiques des électrons avec les bases nucléiques (cytosine et thymine) et la pyrimidine. Ce qui montre que même pour différentes compositions chimiques mais ils ont le même comportement *vis-à-vis* un rayonnement. On peut remarquer à partir de cette figure qu'il y a une petite divergence entre les sections efficaces élastiques des bases nucléiques pyrimidiques et la pyrimidine qui tend à diminuer d'une façon monotone avec l'augmentation de l'énergie. De même, on peut noter que

plus les énergies des électrons émis sont élevées, moins ils sont susceptibles d'entrer en collision avec la molécule de la pyrimidine, et la même chose se produit avec la cytosine et la thymine.

Dans les figures 3, nous montrons des comparaisons entre nos sections efficaces des collisions d'électrons de la pyrimidine avec les données théoriques et expérimentales disponibles dans la littérature.

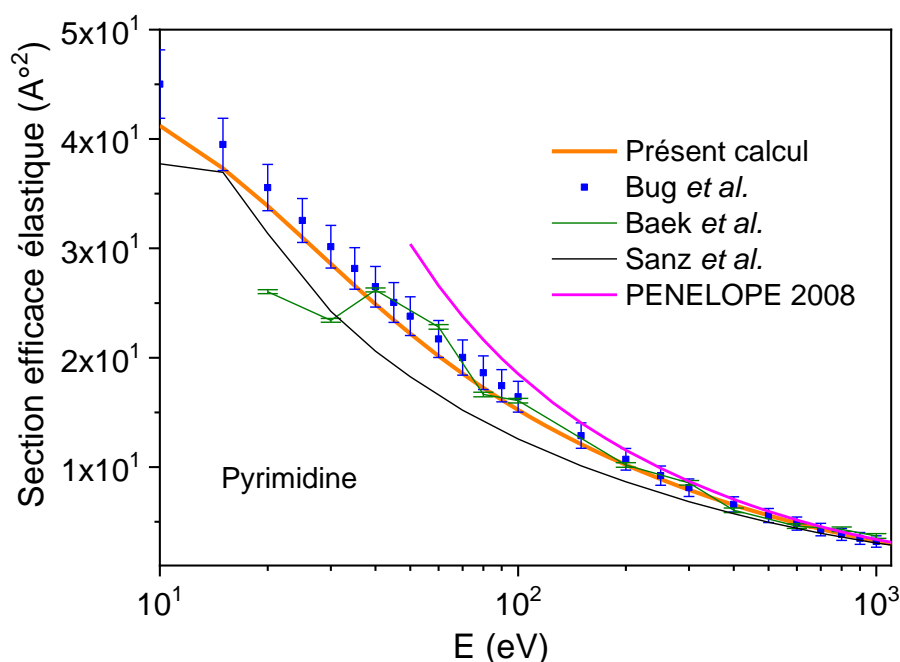


Figure IV.3. Sections efficaces élastiques des électrons de la pyrimidine comparée avec les sections efficaces élastiques des électrons de Sanz (Sanz 2014), base de données PENELOPE de Salvat et al. (2014), Bug et al. (2017), Bug (2014) et Baek et al. (2014).

On peut noter à partir de cette figure que nos données présentent un très bon accord avec les données mesurées de Bug et al. (2017) et Bug (2014). Nous avons utilisé pour le calcul des sections efficaces élastiques atomiques où le potentiel d'interaction inclue le potentiel d'échange sans potentiel de polarisation.

Pour des énergies d'électrons incidents jusqu'à 1 keV, les résultats actuels diffèrent de moins de 15 % par rapport aux données de Bug et al. (2017) et Bug (2014).

Pour des énergies plus faibles, l'effet d'écran entre les atomes de la molécule est très prononcé et conduit à un meilleur accord avec les données mesurées dans les références Bug et *al.* (2017) et Bug (2014). Les données des sections efficaces élastiques de Bug et *al.* (2017) et Bug (2014) représentent l'intégration des sections élastiques différentielle expérimentales jusqu'à 1 keV, ainsi que l'interpolation et l'extrapolation à des énergies de l'ordre des keV basées sur le modèle des ondes partielles. Ce n'est pas le cas pour la procédure d'intégration les données mesurées de Baek et *al.* (2014). Notons qu'à partir d'une énergie incidente de 1 keV, nos résultats diffèrent de moins de 4% par rapport aux données de PENELOPE (Salvat et *al.*, 2015)

Pour des énergies plus élevées, notre modèle se réduit à un modèle simple des atomes indépendant car l'effet d'écran n'a aucun sens et diminue avec l'augmentation des énergies incidentes.

IV.2. Section efficace différentielle élastique

Pour les sections efficaces différentielle élastique, la comparaison est faite avec les résultats théoriques de Fuss (2013) et les résultats expérimentaux de Bug (2014), Bug et *al.*, (2017) comme le montre la figure 4.

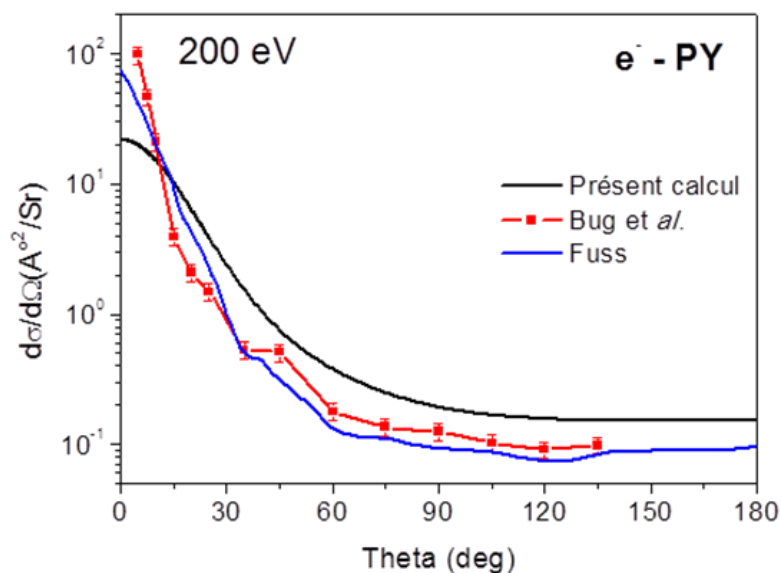


Figure IV.4. Sections efficaces élastiques différentielles des électrons du pyrimidine, comparées avec les sections efficaces élastiques différentielles des électrons de Fuss et al. (2013), Bug et *al.* (2017), Baek et *al.* (2014).

Aux basses énergies inférieures de 200 eV, il y a un faible accord entre l'approche IAM-SCAR et les autres travaux expérimentaux et théoriques comme prévu. Pour les molécules polaires comme la pyrimidine, les rotations peuvent toutefois représenter une contribution majeure à la diffusion totale des sections efficaces.

IV.3. Libre parcours moyen élastique

Le libre parcours moyen des collision d'électrons avec les bases nucléiques de basse est une quantité importante et particulière pour établir des facteurs élémentaires pour des applications quantitatives et pour obtenir des informations sur la profondeur des constituants. Le libre parcours moyen, entre deux événements de diffusion peut être simplement dérivé de la section efficace de diffusion totale.

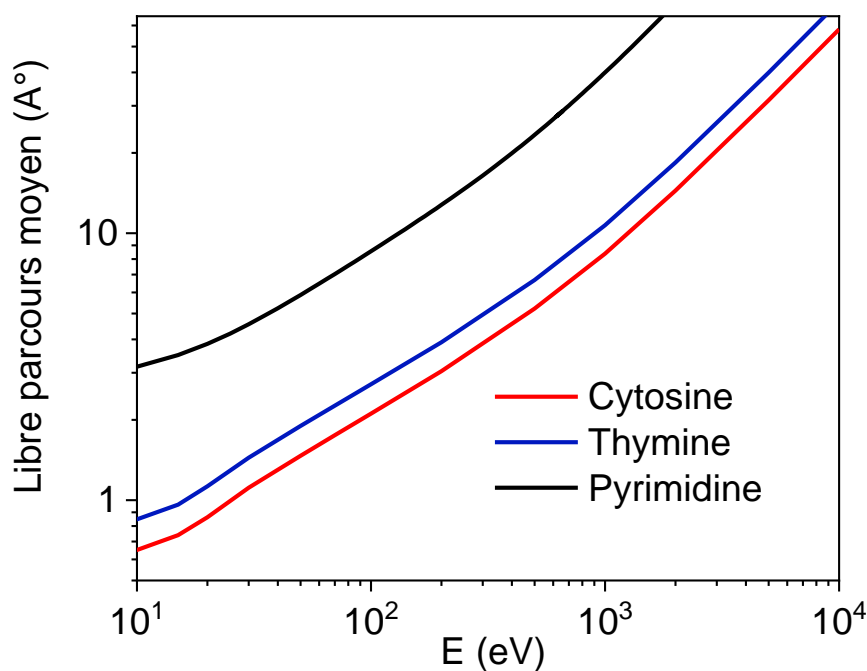


Figure IV.5. Présent calcul du libre parcours moyen élastique des électrons pour la cytosine, la thymine et la pyrimidine respectivement.

Nous présentons dans la figure 5, le libre parcours moyen des collisions élastiques des électrons avec les bases nucléiques pyrimidiques (cytosine et thymine) et celui de la pyrimidine. On peut noter à partir de cette figure que le libre parcours moyen pour les trois molécules citées ci-dessus, augmente avec l'augmentation de l'énergie incidente. Dans la littérature au moins consultée, il n'existe aucune donnée théorique ou expérimentale concernant le libre parcours moyen des collisions élastiques des électrons avec les bases nucléiques ou bien la pyrimidine. On a seulement pris les données théoriques de bug et *al.* (2017) concernant les sections efficaces élastiques pour faire une comparaison significative entre nos résultats et ceux de Sanz et *al.* (2014) et Zecca et *al.* (2000) comme le montre la figure 6.

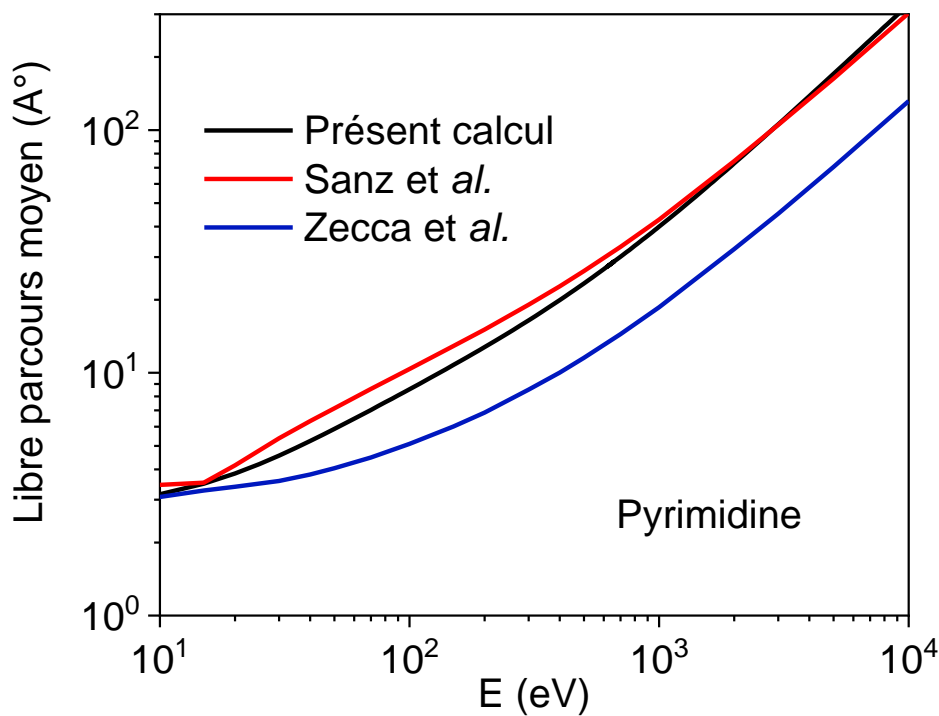


Figure IV.6. Présent calcul du libre parcours moyen élastique des électrons comparés au libre parcours moyen élastique de Sanz et *al.* (2014) et Zecca et *al.* (2014)

On peut noter à partir de cette figure que le libre parcours moyen n'est en désaccord avec notre libre parcours moyen que pour les énergies inférieures à 1KeV où on remarque un désaccord important. Cependant, pour des énergies $\geq 1\text{KeV}$, ces divergences disparaissent. A très basses énergies, l'effet d'écran entre les atomes est important mais d'autres effets quantiques doivent être pris en compte. Lorsque l'énergie incidente augmente, l'effet d'écran

diminue et disparaît complètement et les sections efficaces élastiques peuvent être facilement évaluées à l'aide de la règle d'additivité (AR) et le résultat repose sur la précision des sections efficaces élastiques atomiques.

Conclusion générale

Conclusion générale

Les sections efficaces des atomes, qui constituent les biomolécules citées, sont calculées à l'aide de l'analyse des ondes partielles de Dirac à des énergies incidentes comprises entre 10 eV et 100 keV. Pour les sections efficaces élastiques moléculaires, nous avons appliqué la méthode SCAR (une correction d'écran géométrique) où l'effet d'écran est important à basse et moyenne énergie (supérieure à ~ 100 eV). À quelques KeV d'énergie incidente, l'effet d'écran entre les atomes disparaît rapidement ; par conséquent, notre modèle se réduit à un simple modèle atomique indépendant.

Pour des énergies d'électrons incidents jusqu'à 1 keV, les résultats actuels diffèrent de moins de 15 % par rapport aux données de Bug et al. (2017) et Bug (2014).

Aux basses énergies inférieures de 200 eV, il y a un faible accord entre l'approche IAM-SCAR et les autres travaux expérimentaux et théoriques comme prévu. Pour les molécules polaires comme la pyrimidine, les rotations peuvent toutefois représenter une contribution majeure à la diffusion totale des sections efficaces.

Pour le libre parcours moyen inélastique, un bon accord a été trouvé pour les énergies supérieures à 100 eV. Pour les énergies inférieures à 100 eV, on remarque la présence d'un écart qui est dû d'une part à l'utilisation des données théoriques dans le calcul de Bug et d'autre part.

A très basses énergies, l'effet d'écran entre les atomes est important mais d'autres effets quantiques doivent être pris en compte. Lorsque l'énergie incidente augmente, l'effet d'écran diminue et disparaît complètement et les sections efficaces élastiques peuvent être facilement évaluées à l'aide de la règle d'additivité (AR) et le résultat repose sur la précision des sections efficaces élastiques atomiques.

Références bibliographiques

- Alvarado, A., Chang, H. Y., Nadvornick, W., Ghoniem, N., & Marian, J. (2019). Monte Carlo raytracing method for calculating secondary electron emission from micro-architected surfaces. *Applied Surface Science*, 478, 142-149.
- Ancel, L. (2013). Reconnaissance de l'ADN par des complexes peptidiques des lanthanides (Doctoral dissertation, Grenoble).
- Anderson, C. D. (1933). Cosmic-ray positive and negative electrons. *Physical Review*, 44(5), 406.
- Aouina, N. Y. (2020). Simulation Monte Carlo du passage d'électrons énergétiques dans l'ADN et l'eau.
- Aouina, N. Y., & Chaoui, Z. E. A. (2018 a). Simulation of positron and electron elastic mean free path and diffusion angle on DNA nucleobases from 10 eV to 100 keV. *Surface and Interface Analysis*, 50(10), 939-946.
- Aouina, N. Y., & Chaoui, Z. E. A. (2018). Electrons and positrons elastic collisions with pyrimidine and tetrahydrofuran. *Applied Radiation and Isotopes*, 140, 347-354.
- Attix, F. H. (2008). Introduction to radiological physics and radiation dosimetry. John Wiley & Sons.
- Bethe, H. (1930). Zur theorie des durchgangs schneller korpuskularstrahlen durch materie. *Annalen der Physik*, 397(3), 325-400.
- Bethe, H., & Heitler, W. (1934). On the stopping of fast particles and on the creation of positive electrons. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 146(856), 83-112.
- Blanco, F., & García, G. (2004). Screening corrections for calculation of electron scattering differential cross sections from polyatomic molecules. *Physics Letters A*, 330(3-4), 230-237.
- Blanco, F., & García, G. (2007). Calculated cross sections for electron elastic and inelastic scattering from DNA and RNA bases. *Physics Letters A*, 360(6), 707-712.
- Bordes, J. (2017). Modélisation du transport des électrons de basse énergie avec des modèles physiques alternatifs dans Geant4-DNA et application à la radioimmunothérapie (Doctoral dissertation, Université Paul Sabatier-Toulouse III).
- Brahme, A. (2014). *Comprehensive biomedical physics*. 1st Edition, Elsevier ISBN : 978-0-444-53633-4.
- Bruch, J. F., Eloit, M., Tabareau-Delalande, F., El Gani, M., Pettereau, A., & Jousset, S. (2019). Étude historique de la visualisation de l'acide désoxyribonucléique. *Revue Francophone des Laboratoires*, 2019(511), 71-80.
- Bruining, H. (2016). *Physics and Applications of Secondary Electron Emission: Pergamon Science Series: Electronics and Waves—a Series of Monographs*. Elsevier.
- Carlson, T. A., & Krause, M. O. (1965). Experimental evidence for double electron emission in an Auger process. *Physical Review Letters*, 14(11), 390.
- Darlington, E. H., & Cosslett, V. E. (1972). Backscattering of 0.5-10 keV electrons from solid targets. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 5(11), 1969.
- Drake, J. F., Swisdak, M., Che, H., & Shay, M. A. (2006). Electron acceleration from contracting magnetic islands during reconnection. *Nature*, 443(7111), 553-556.
- Francis, Z. (2007). Simulations Monte-Carlo et étude microdosimétrique pour des irradiations cellulaires à faibles doses en neutrons de 14 MeV (Doctoral dissertation, Université Blaise Pascal-Clermont-Ferrand II).
- Frelin, S. (2011). *Biologie de l'évolution et médecine*. Lavoisier.
- Fréneau, A. (2018). Etude comparative des effets moléculaires et cellulaires induits par des rayonnements X de différentes énergies (Doctoral dissertation, Université Paris-Saclay (ComUE)).

- Gillard, N. (2005). Effets des radiations ionisantes sur des complexes ADN-protéine (Doctoral dissertation, Université d'Orléans).
- Heather, J. M., & Chain, B. (2016). The sequence of sequencers: The history of sequencing DNA. *Genomics*, 107(1), 1-8.
- Heger, G. (2008). Introduction à l'interaction rayonnement matière. In *Collection de la Société Française de la Neutronique* (Vol. 9, pp. 19-33). EDP Sciences.
- Heim, T. (2002). Transport électronique dans l'ADN (Doctoral dissertation, Université des Sciences et Technologie de Lille-Lille I).
- <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:D-deoxyribose-3D-balls.png>
- <https://planet-vie.ens.fr/thematiques/cellules-et-molecules/molecules/la-decouverte-de-la-structure-de-l-adn>
- <https://www.aquaportail.com/definition-3998-desoxyribose.html>
- https://www.assistancescolaire.com/eleve/1re/sciences-de-la-vie-et-de-la-terre/reviser-le-cours/1_t_02/print?print=1&printSheet=1
- Jay-Gerin, E. P. J. P. (2007). Etude théorique des collisions d'électrons de basse énergie avec des molécules d'intérêt biologique (Doctoral dissertation, University College London).
- Jimonet, C., & Metivier, H. (2007). The expert person in radiation protection. Principles of radiation protection-regulation; Personne compétente en radioprotection. Principes de radioprotection-règlementation.
- Jimonet, C., & Métivier, H. (2021). Chapitre 9: Réglementation en radioprotection. In *Principes de radioprotection-Réglementation* (pp. 223-320). EDP Sciences.
- Kibler, M., & Poizat, J. C. (2003). La Physique pour la Santé: du diagnostic à la thérapie (p. 240). Institut de physique nucléaire de Lyon.
- Lekadir, H. (2010). Etude théorique des processus ionisants induits par impact d'ions sur des molécules d'intérêt biologique: application au développement d'une simulation Monte Carlo de suivi de protons dans la matière biologique (Doctoral dissertation, Université Paul Verlaine-Metz).
- Lemouari, S., & Bazine, Z. (2020). Etude de l'influence des photons X sur l'ADN plasmidique en phase aqueuse par Simulation Monte-Carlo (Doctoral dissertation, University of Jijel).
- Lyoussi, A. (2021). Détection de rayonnements et instrumentation nucléaire. EDP sciences.
- Ottini-Hustache, S. (2001). L'interaction rayonnement-matière et les grandes familles de détecteurs.
- Palihawadana, P., Sullivan, J., Brunger, M., Winstead, C., McKoy, V., Garcia, G., & Buckman, S. (2011). Low-energy elastic electron interactions with pyrimidine. *Physical Review A*, 84(6), 062702.
- Platzman, R. L. (1960). Probabilité d'ionisation par transfert d'énergie d'atomes excités à des molécules. *Journal de Physique et le Radium*, 21(12), 853-858.
- Ratliff, S. T. (2009). Resource letter MPRT-1: medical physics in radiation therapy. *American Journal of Physics*, 77(9), 774-782.
- Salvat, F. (2003). Optical-model potential for electron and positron elastic scattering by atoms. *Physical Review A*, 68(1), 012708.
- Salvat, F., & Fernández-Varea, J. M. (2009). Overview of physical interaction models for photon and electron transport used in Monte Carlo codes. *Metrologia*, 46(2), S112.
- Salvat, F., Jablonski, A., & Powell, C. J. (2005). ELSEPA—Dirac partial-wave calculation of elastic scattering of electrons and positrons by atoms, positive ions and molecules. *Computer physics communications*, 165(2), 157-190.
- Sanz, A. G. (2014). Interaction of electrons and positrons with molecular systems of biological interest (Doctoral dissertation, Universidad Autónoma de Madrid).

- Sanz, A. G., Fuss, M. C., Blanco, F., Carelli, F., Sebastianelli, F., Gianturco, F. A., & García, G. (2014). Electron scattering cross sections from anthracene over a broad energy range (0.00001–10,000 eV). *Applied Radiation and Isotopes*, 83, 68-76.
- Tabet, J. (2007). Irradiation de molécules biologiques (bases de l'ADN et de l'ARN) par impact de protons dans le domaine de vitesse du pic de Bragg (20-150 keV/uma) (Doctoral dissertation, Université Claude Bernard-Lyon I).
- Turner, J. E. (2008). *Atoms, radiation, and radiation protection*. John Wiley & Sons.
- Victor, J. M. (2012). *La structure de l'ADN en double hélice*. Bibnum. Textes fondateurs de la science.
- W. R. Hendee, E. R. Ritenour, *Intermediate Physics for Medicine and Biology*, 4th edition, Wiley-Liss, Inc., New York, ISBN 0-471-38226-4 (2002).
- Walker, A. M. (1971). On the estimation of a harmonic component in a time series with stationary independent residuals. *Biometrika*, 58(1), 21-36.
- Weiss, A., Mayer, R., Jibaly, M., Lei, C., Mehl, D., & Lynn, K. G. (1988). Auger-electron emission resulting from the annihilation of core electrons with low-energy positrons. *Physical review letters*, 61(19), 2245.
- Wozny, A. S. (2018). Mécanismes moléculaires spécifiques de la réponse aux ions carbone dans les cellules tumorales (souches et non souches) des cancers des Voies Aéro-Digestives Supérieures (Doctoral dissertation, Université de Lyon).
- Zein, S. A., Bordage, M. C., Francis, Z., Macetti, G., Genoni, A., Dal Cappello, C., ... & Incerti, S. (2021). Electron transport in DNA bases: An extension of the Geant4-DNA Monte Carlo toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 488, 70-82.
- Zouckermann, R. (1957). La diffusion élastique des électrons. *J. Phys. Radium*, 18(2), 133-137.

ملخص

تم تخصيص هذا العمل لحساب المقاطع العرضية لتشتت الإلكترون الكلي مع جزيئات ذات أهمية بيولوجية مثل قواعد بيريميدين وبيريميدين. لذلك، لحساب إجمالي المقاطع العرضية المرنة، طبقنا قاعدة الجمع مع تصحيح الشاشة (SCAR) من 10 فولت إلى 100 كيلو فولت. يوفر هذا العمل متوسط المسارات الحرة المرنة لتصادم الإلكترونات من أجل فهم أفضل للتأثيرات البيولوجية للإشعاع المؤين. تقدم الدراسة الحالية نتائج مفصلة عن التفاعلات المرنة بين الجسيمات المشحونة.

الكلمات المفتاحية: المقاطع العرضية للإلكترون المرنة، المرونة تعني المسار الحر، قواعد بيريميدين ، بيريميدين ، SCAR

Résumé

Ce travail est consacré au calcul des sections efficaces de diffusion totale d'électrons avec des molécules d'intérêt biologique telles les bases pyrimidiques et la pyrimidine. Par conséquent, pour calculer les sections efficaces élastiques totales, nous avons appliqué la règle d'additivité avec correction d'écran (SCAR) de 10 eV à 100 KeV. Ce travail fournit les libres parcours moyens élastiques des collisions d'électrons afin de mieux comprendre les effets biologiques des rayonnements ionisants. La présente étude fournit des résultats détaillés sur les interactions élastiques entre particules chargée.

Mots clés : Sections efficaces élastiques des électrons, libre parcours moyen élastique, bases pyrimidiques, pyrimidine, SCAR

Abstract

This work is devoted to the calculation of the cross sections of total electron scattering with molecules of biological interest such as pyrimidine bases and pyrimidine. Therefore, to calculate the total elastic cross sections, we applied the additivity rule with screen correction (SCAR) from 10 eV to 100 KeV. This work provides the elastic mean free paths of electron collisions in order to better understand the biological effects of ionizing radiation. The present study provides detailed results on elastic interactions between charged particles.

Key words: Elastic electron cross sections, elastic mean free path, pyrimidine bases, pyrimidine, SCAR