

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

جامعة محمد بوضياف/المسيلة

UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF DE M'SILA



FACULTEDES SCIENCES

DEPARTEMENT DE MICROBIOLOGIE ET BIOCHIMIE

MEMOIRE : MASTER ACADEMIQUE

FILIERE: BIOLOGIE

OPTION: BIOCHIMIE APPLIQUEE

Présenté par

DJEDDAOUI HAFIDA

Thème :

Modélisation et simulation de l'interaction d'un faisceaux d'électrons avec les bases d'ADN

DEVANT LE JURY :

Pr. BOUDJELAL AMEL

Université de M'sila

Président

Dr. AOUINA NABILA YASMINA

Université de M'sila

Encadreur

Dr. BENKHALED ABDERRAHIM

Université de M'sila

Examineur

Promotion : 2020-2021

Remerciements

Le présent document couronne mes études universitaires très riche en enseignements et expériences tant sur le plan du savoir scientifique que de celui de la vie en collectivité.

Je remercie Dieu pour nous avoir données la vie éternelle, aide, patience et courage tout au long de ma vie.

Je remercie très vivement mon promoteur Dr NABILA NASMIRA AOUNA d'avoir accepté de me guider et de m'aider. Merci d'avoir toujours eu confiance en moi. Merci pour votre soutien. Vous étiez toujours à ma disposition pour réaliser ce modeste travail.

Mes vifs remerciements vont également au Pr Boudjellal Amel qui m'a fait l'honneur de présider le jury et au Dr Benkhaled abderrahim d'avoir accepté d'être examinateur de ce mémoire.

Un grand merci à ma famille.

Un merci pudique à mes amis, mes collègues en Master 2 et tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la concrétisation de cette œuvre.



Dédicace

Si les succès sont un cadeau, je dédie Ce modeste travail:

*À tous les personnes qui m'ont aidé pour que je retourne à l'université
après que j'ai décidé d'arrêter mes études.*

*À tous les personnes qui m'ont aidé et m'encouragé à étudier, je cite
Monsieur et Madame BENKHALED, ASALA, WALIDE, IMANE et
RIME*

*À mon encadreur Dr. NABILA YASMINA AOUINA pour tous ces
conseils et son aide.*

*À mes chers parents ; mon support dans ma vie, mon père et la
personne la plus chère à mes yeux à ma mère qui a tout sacrifié pour
moi.*

À toutes ma grande famille.

*À toutes ma famille universitaire NACIRE, SILA ASHOUAKE
MENIRA SALIHA, IBTISAM, NADA, RAWAN et tous.*

À tous mes amis : ACHOUAKE, SARAH et tous.

*À tous mes collègues et mes professeurs de l'école primaire à
l'université.*

À toute la promotion Biochimie appliquée 2017/2021.



Sommaire

Remerciements	i
Abréviations	ii
Liste des tableaux	iii
Liste des figures	iv
Introduction générale	01
Interaction des rayonnements avec la matière	
I.1. Introduction	02
I.2. Classification des rayonnements	02
I.3. Phénomène d'interaction	03
I.4. Diffusion élastique	05
I.5. Diffusion inélastique	06
I.5.1. Emission Auger	08
I.5.2. Électrons secondaires	08
I.5.3. Bremsstrahlung	08
I.5.4. Pouvoir d'arrêt par freinage	10
Structure et composants de l'ADN	
II.1. Introduction	11
II.2. Découverte de l'ADN	11
II.2. Structure et constituants de l'ADN	12
II.2.1. Désoxyribose	12
II.2.2. Bases azotées	13
II.2.3. Phosphate	14
II.2.4. Bases complémentaires	15
II.3. Double hélice	16
II.4. Grand et petit sillons	18
II.5. Impact radiobiologique	19
Matériels et méthodes	
III.1. Introduction	21
III.2. Calcul de sections efficaces élastiques	21
III.2.1. Sections efficaces élastiques avec les atomes et avec les molécules	22
III.2.2. Sections efficaces des collisions élastiques avec les atomes	22
III.2.3. L'analyse relativiste de Dirac des ondes partielles	23
III.3. Sections efficaces des collisions élastiques avec les molécules	25
III.3.1. Méthode des règles d'additivité avec correction d'écran (SCAR)	25
III.4. Libre parcours moyen élastique de l'électron	27
Résultats et discussions	
IV. Résultats et discussions	27
IV.1. Sections efficaces élastiques	27
IV.2. Libre parcours moyen élastique	31
Conclusion générale	33
Références bibliographique	

Liste des abréviations

A : Adénine

ADN : Acide désoxyribonucléique

AR : Règle d'additivité

ARN: Acide ribonucléique

C: Cytosine

DHF: Dirac–Hartree – Fock

DHFS: Dirac–Hartree – Fock-Slater

el : élastique

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

eV: Électron-volt ($=1.6 \times 10^{-19}$ joule) (Electron-volt).

FORTTRAN: formula translation

G: Guanine

HF: Hartree – Fock

IAM : méthode de l'atome indépendant

inel : inélastique

KeV : Kilo électronvolt

NB : Bases nucléiques

nm : Nanomètre.

SCAR : règles d'additivité avec correction d'écran

SE : Section efficace

T : Thymine

TF: Thomas–Fermi

TFD : Thomas – Fermi – Dirac

TFM : Thomas–Fermi–Molière

Liste des tableaux

Structure et composants de l'ADN

Tableau II.1 : Comparaison des propriétés structurales des ADNs A,B et Z. (Brunet, 2015)

18

Liste des figures

Interaction des rayonnements avec la matière

Figure I.1 : Différents types de rayonnements et leurs effets	03
Figure I.2 : Interaction entre un faisceau d'électrons et la surface d'un échantillon	04
Figure I.3 : Organigramme des différentes interactions possibles et des signaux émis lors de la pénétration d'un électron primaire dans la matière	05
Figure I.4 : Diffusion élastique et inélastique entre un électron incident de haute énergie et un atome.	06
Figure I.5 : Phénomène d'ionisation	07
Figure I.6 : Phénomène d'excitation	07
Figure I.7 : Rayonnement de freinage : Bremsstrahlung	09

Structure et composants de l'ADN

Figure II.1 : Représentation schématique de la composition chimique d'un nucléotide d'ADN	12
Figure II.2 : Représentation de la 2-désoxyribose et le ribose	13
Figure II.3 : Représentation des bases azotées d'ADN	14
Figure II.4 : Représentation d'une molécule de phosphate et d'une molécule de sucre désoxyribose en interaction avec les autres constituants de l'ADN	15
Figure II.5 : Représentation des bases azotées complémentaires des deux brins de l'ADN qui sont reliées entre elles par des liaisons hydrogène	15
Figure II.6 : Structure chimique d'un simple brin d'ADN	16
Figure II.7 : Représentation des principales formes de double hélice de l'ADN	17
Figure II.8 : Représentation du grand et du petit sillon d'ADN	19
Figure II.9 : Principaux sites de modifications sur l'ADN	20

Résultats et interprétations

Figure IV.1 : Sections efficaces élastiques des électrons de l'adénine pour différents potentiels d'interaction	27
------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-----------

Figure IV.2 : Sections efficaces élastiques des électrons de l'adénine comparées avec les sections efficaces élastiques des électrons de Blanco et Garcia (2007), Vinodkumar et al. (2014), dCMP, dGMP et dTMP respectivement	28
Figure IV.3 : Sections efficaces élastiques des électrons de la cytosine comparée avec les sections efficaces élastiques des électrons de Blanco et Garcia (2007), Vinodkumar et al. (2014)	28
Figure IV.4 : Sections efficaces élastiques des électrons de la thymine comparée avec les sections efficaces élastiques des électrons Blanco et Garcia (2007), Vinodkumar et al. (2014)	29
Figure IV.5 : Sections efficaces élastiques des électrons de la guanine comparée avec les sections efficaces élastiques des électrons de Blanco et Garcia (2007), Vinodkumar et al. (2014), Penelope (2008)	29
Figure IV.6 : Sections efficaces des collisions élastiques des électrons avec les bases nucléiques (adénine, cytosine, guanine et thymine) respectivement	31
Figure IV.7 : Libre parcours moyens des collisions élastiques des électrons avec les bases nucléiques (adénine, cytosine, guanine et thymine) respectivement.	32

Introduction générale

Introduction générale

L'avènement de la radiothérapie a permis d'avoir un nouveau regard sur le développement de l'imagerie radiologique et de la médecine nucléaire, ainsi que les risques d'exposition potentielle auxquelles sont soumises les populations. La radioprotection prend de plus en plus d'importance (Gillard, 2005). La radiobiologie étudie les effets des rayonnements ionisants sur les êtres vivants. Des procédés modernes d'imagerie ont ouvert des perspectives extraordinaires vers l'étude de l'interaction du rayonnement ionisant avec la matière biologique principalement l'ADN.

Les milieux biologiques sont constitués d'atomes de numéro atomique faible (C, H, O...), et les interactions que présentent les particules ionisantes sont essentiellement des "collisions" avec les électrons du milieu. Selon l'importance de l'énergie communiquée à l'électron, la molécule à laquelle il appartient est ionisée, excitée ou acquiert un supplément d'énergie "thermique". Ces interactions peuvent également donner lieu à un phénomène de transfert de charge entre la particule incidente et les atomes du milieu (Francis, 2007).

La simulation par la méthode Monte Carlo de l'interaction des électrons avec le solide est largement utilisée depuis plusieurs années dans divers domaines d'applications; notamment pour les techniques de caractérisation des surfaces et de la spectroscopie électronique.

Plusieurs modèles de simulation Monte Carlo sont alors proposés et utilisés à des fins spécifiques, basées sur différentes approches de traitement des diffusions (élastiques et inélastiques) des électrons. (Azli, 2010). L'objectif de ce travail est de tenter de développer des technologies basées sur les rayonnements permettant de simuler l'interaction des électrons avec les bases d'ADN élastiquement (entre 10 et 100 eV),

Ce mémoire est présenté de la manière suivante :

Dans le premier chapitre, je présente les éléments principaux de la structure de l'ADN à différentes échelles et je donne un rappel général sur les interactions rayonnement-matière et spécifiquement l'interaction électron- matière (beaucoup plus les diffusions élastiques). Le deuxième chapitre est consacré à la description des méthodes de diffusion utilisées dans ce travail pour traiter les collisions électron molécule, à savoir la méthode SCAR, une forme corrigée du modèle d'atome indépendant (IAM-SCAR) pour les énergies de 10 eV à 10 KeV. Le troisième chapitre montre les résultats des collisions élastiques des électrons avec les bases de l'ADN.

*Interaction rayonnement
matière*

I.1. Introduction

Initialement, Toute radiation capable d'arracher un ou plusieurs électrons à la matière appartient à la catégorie des rayonnements ionisants (Regulus, 2006). Les rayonnements ionisants sont des rayonnements électromagnétiques ou corpusculaires dont l'énergie est suffisante pour arracher un électron à une structure atomique ou moléculaire. Les rayonnements les plus étudiés et/ou usités sont les rayons α (alpha) et β (bêta) pour ceux corpusculaires, et les rayons γ (gamma) et X pour ceux électromagnétiques. (Federighi, 2019).

I.2. Classification des rayonnements

Selon Farah (2009), sont classer selon leur nature propre, indépendamment de la matière dans laquelle ils se propagent et cèdent de l'énergie. Cette classification est basée sur la charge électrique des particules constituant le rayonnement. On deux types dont les premiers sont neutres (photons, neutrons) et les seconds sont chargés (électrons, ions).

Une autre classification possible des rayonnements tient compte cette fois de leur effet sur le milieu. On est ainsi amené à définir les rayonnements ionisants ou non comme suit : Un rayonnement est dit ionisant, s'il possède une énergie suffisante pour arracher un électron aux atomes du milieu rencontré et les transformer ainsi en ions positifs. Il est non ionisant dans le cas contraire. (Figure 1) :

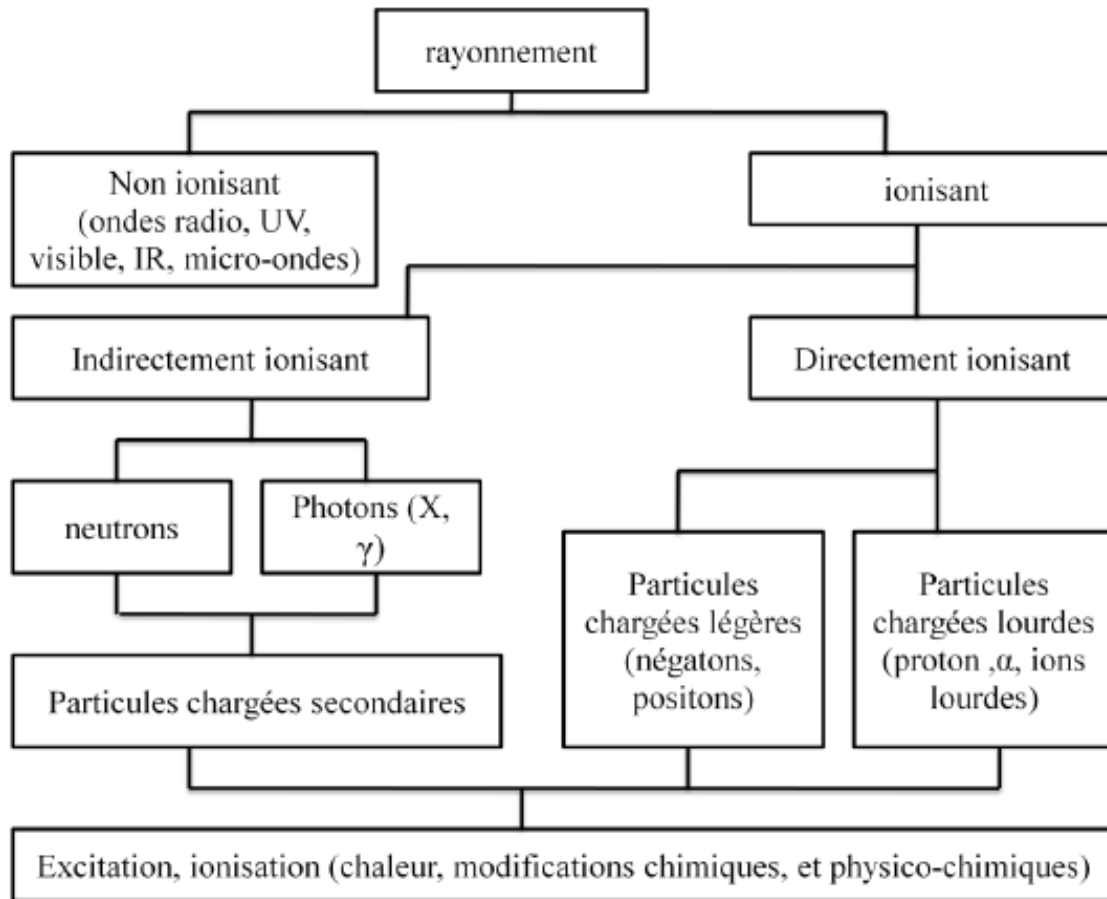


Fig.I.1. Différents types de rayonnements et leurs effets (Dahi et Meherchi, 2011).

<https://www.memoireonline.com/07/12/6070/Syteme-de-double-calcul-dosimetrique.html>

En pratique, seule les ondes électromagnétiques de longueur d'onde supérieure à 100 nm (onde radio, micro-ondes, infrarouge, visible et proche ultraviolet) sont non ionisantes. Par contre, dans nos expériences, les énergies des rayonnements gamma et électrons utilisés dans l'irradiation des verres possèdent des énergies importantes de l'ordre du MeV et par conséquent ils sont ionisants (FARAH, 2009).

I.3. Phénomène d'interaction

L'étude de l'interaction des électrons avec la matière solide a débuté vers la fin de l'avant dernier siècle (Lenard en 1895). Les premières théories Bothe (1933) et (1949), Bethe (1933) et (1938) s'intéressaient au domaine des hautes énergies (Kakaya et Okayama, 1972).

L'interaction des particules chargées avec la matière est différente de celle des rayonnements électromagnétiques. Représente un faisceau de particules chargées de masse M , de charge Z et d'énergie E qui traverse une épaisseur Δx du milieu. Après la traversée d'une

épaisseur Δx la distribution en énergie, ainsi que la distribution angulaire sont modifiées. (Francis, 2007), On plus, Les interactions uniques entre les électrons et la matière étant relativement très fréquentes pour les faibles transferts d'énergie, les études par transmission ne peuvent se faire que sur des couches très minces (moins de 1000 Å pour des électrons de moins de 100 keV) (Wehenkel, 1975). 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. Cette caractéristique empêche de transposer immédiatement les résultats correspondants aux électrons (Francis, 2007).

Les différentes interactions de l'électron avec le matériau entraînant des effets non négligeables en regard des observations à faire, sont les interactions élastiques des électrons avec les atomes, les interactions inélastiques individuelles avec les électrons atomiques et les interactions inélastiques collectives avec les électrons libres (Terrissol et Patau, 1978), (Figure 11). Les électrons qui pénètrent dans le matériau subissent des interactions électromagnétiques qui ont deux effets : une déviation de leur direction et une variation de leur énergie cinétique primaire (Azli, 2010). (Figure 2) :

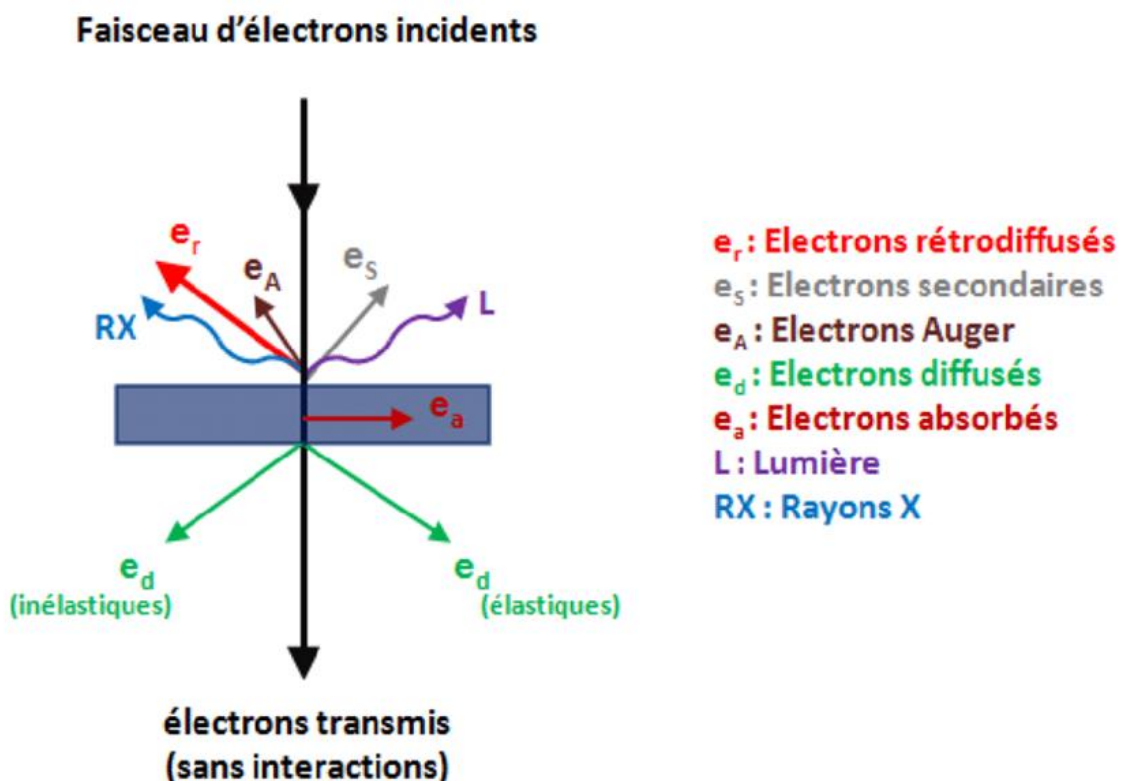


Fig.I.2. Interaction entre un faisceau d'électrons et la surface d'un échantillon.

https://www.researchgate.net/figure/Figure-A-2-Interaction-entre-un-faisceau-delectrons-et-la-surface-dun-echantillon_fig33_317082104

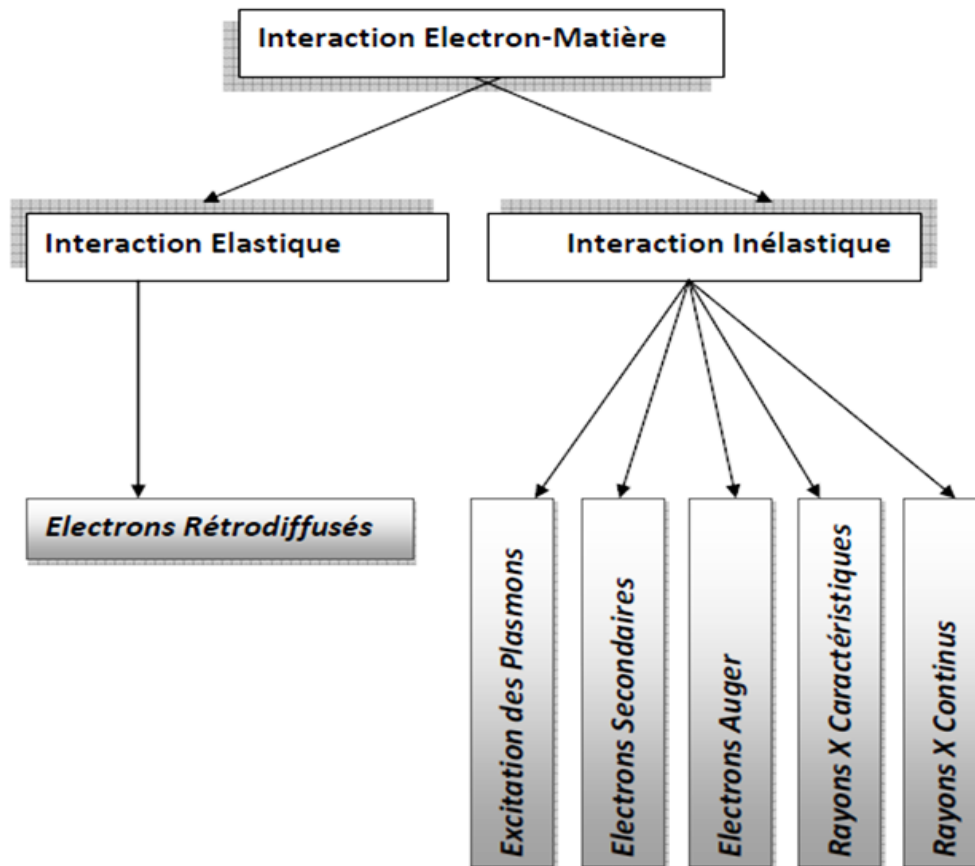


Fig.I.3. Organigramme des différentes interactions possibles et des signaux émis lors de la pénétration d'un électron primaire dans la matière (Azli, 2010).

I.4. Diffusion élastique

Lord Rutherford donna en 1911 la première théorie de la diffusion élastique des particules chargées (électrons, particules α) (Zouckermann, 1957). Considérons un électron passant au voisinage du noyau. On s'intéresse au phénomène de diffusion élastique où l'énergie du noyau dont la masse est grande par rapport à celle de l'électron ne change pas d'une façon appréciable au cours de l'interaction (Askri, 2002).

Dans le cas d'interaction proche de la surface, l'électron peut ressortir par la face avant du matériau. On dit qu'il est rétrodiffusé. La proportion et les énergies de tels électrons dépendent de leurs énergies primaires ainsi que des propriétés physiques du matériau considéré.

Cependant, la majorité des électrons suivent leurs chemins sans trop s'approcher du noyau en raison de l'écrantage produit par les électrons atomiques (Kanaya et Okayama, 1972).

La figure 4 représentée les deux types de collision :

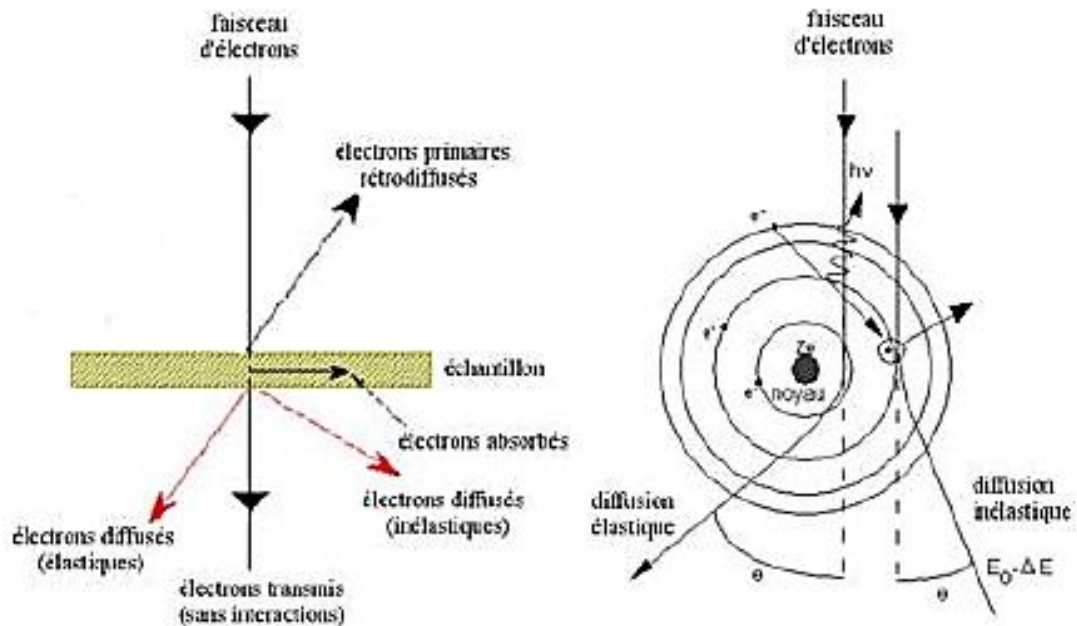


Fig.I.4. Diffusion élastique et inélastique entre un électron incident de haute énergie et un atome.

https://www.researchgate.net/figure/Diffusion-elastique-et-inelastique-entre-un-electron-incident-de-haute-energie-et-un_fig4_348486761

I.5. Diffusion inélastique

Les interactions inélastiques se font entre électrons incidents et électrons atomiques (Najar, 1992). L'interaction est de nature inélastique, caractérisée par un transfert d'énergie ε et une faible diffusion angulaire θ , inférieure $\pi/2$ (Zeller et ruste, 1976).

Dans le choc inélastique le transfert d'énergie ε est relié à l'angle de diffusion θ et à l'énergie de la particule E par la relation (Zeller et ruste., 1976) :

$$\varepsilon = E. \sin^2 \theta \tag{1}$$

Dans le cas des semi-conducteurs et des isolants, on assiste pour les électrons externes à une transition inter-bande et donc à la création d'une paire (é-t). Alors que dans un métal cette transition s'effectue au sein d'une même bande d'un état vers un autre état plus énergétique (Najar, 1992).

Les diffusions inélastiques peuvent être associées sans difficulté aux diffusions élastiques et l'on peut prendre en considération la perte d'énergie lors du cheminement des

électrons dans les spécimens en tenant compte de l'élargissement du faisceau (Soum *et al.*, 1987). Si la collision se fait avec un électron des couches externes, l'énergie de liaison est négligée et il y aura éjection de l'électron secondaire avec l'énergie cédée par l'électron incident, lui-même dévié. Si la collision se fait avec un électron des couches internes et si l'énergie cédée est supérieure à l'énergie de liaison, une émission de recombinaison interne aura lieu à la suite de l'éjection de l'électron de valence (Garnier, 2018).

Cependant, il faut distinguer les électrons du cœur et ceux des couches externes. Les électrons du cœur sont très liés au noyau et leur excitation met en jeu une énergie supérieure à leur énergie de liaison.

Sous l'impact de l'électron incident, ils subissent une transition vers un niveau inoccupé d'énergie plus élevée. L'électron incident voit alors son énergie cinétique diminuer. Le processus de désexcitation se produit immédiatement après et l'entité excitée restitue rapidement l'énergie qu'elle a acquise dans ce processus soit radiativement, soit par transfert à un électron externe ou à un électron interne de niveau plus élevée. Celui-ci retombe au niveau du cœur inoccupé.

L'excès d'énergie est libéré sous forme d'un rayonnement électromagnétique (rayon x) ou d'énergie cinétique à un autre électron atomique du cœur (Najar, 1992). (Figures 5 et 6 représentant les deux phénomènes). Donc, L'ionisation est une collision inélastique d'une particule chargée avec les électrons atomiques conduisant à l'éjection d'un électron de l'atome, appelé électron secondaire. La section efficace différentielle par atome donne la probabilité d'éjection d'un électron avec une énergie cinétique par une particule incidente d'énergie cinétique dans un matériau de numéro atomique (Perrot, 2011).

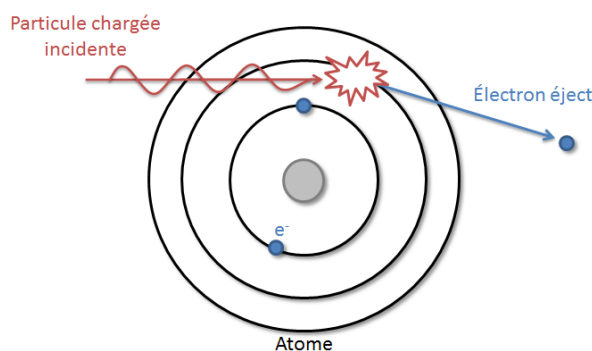


Fig.I.5. Phénomène d'ionisation.

<http://steevespaces.free.fr/DATA/Particularit%E9s%20do%20sim%E9triques%20et%20de%20radioprotection,%20aspects%20fonctionnels.html>

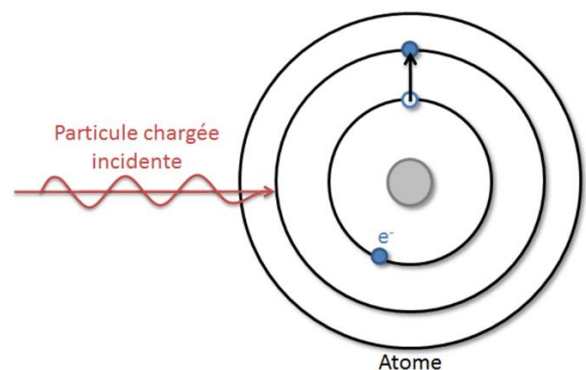


Fig.I.6. Phénomène d'excitation.

<http://steevespaces.free.fr/DATA/Particularit%E9s%20do%20sim%E9triques%20et%20de%20radioprotection,%20aspects%20fonctionnels.html>

Le retour à un état d'équilibre (désexcitation) s'effectue soit par émission radiative (émission X) soit par émission non radiative (émission Auger) (Azli, 2010).

I.5.1. Emission Auger

Au lieu d'être émise directement sous forme du rayonnement X, l'énergie libérée durant les transitions entre les divers états électroniques, peut être utilisée pour éjecter un deuxième électron d'un autre niveau. Ce phénomène a lieu près de la surface (autour de 5nm) et nous permet donc l'étude la surface et la composition chimique de la cible (Nadia, 2016).

I.5.2. Électrons secondaires

Les électrons secondaires sont produits par les interactions inélastiques d'un faisceau d'électrons incidents avec les électrons de valence et de conduction qui provoquent l'éjection de ces électrons. Certains de ces électrons expulsés émergent de la surface de l'échantillon après avoir subi d'autres événements de diffusion dans l'échantillon.

La plus forte région du spectre en énergie des électrons émis est due aux électrons secondaires qui parviennent à quelques nanomètres de la surface, avec des énergies inférieures à 50 eV, et sont appelés électrons secondaires vrais (Azli, 2010).

I.5.3. Bremsstrahlung

Lors d'une interaction inélastique, l'électron incident est dévié de sa trajectoire et transfère une partie de son énergie cinétique à un électron atomique ou bien sous forme de rayonnement de freinage, appelé production bremsstrahlung. Cette perte d'énergie est représentée par le pouvoir d'arrêt (Perrot, 2011) (Figure 7).

Le pouvoir d'arrêt est une information importante, en particulier lors d'applications biologiques, puisqu'il permet de quantifier l'énergie perdue par unité de distance traversée par la particule (Le Loirec, 2007).

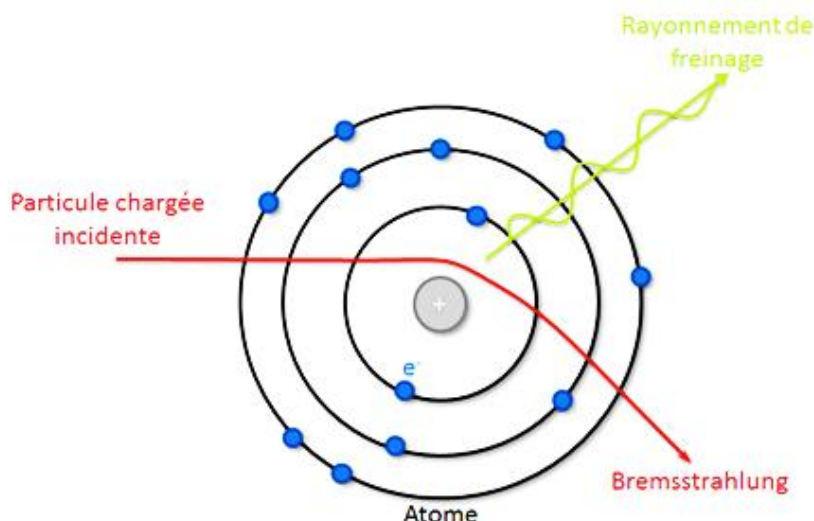


Fig.I.7. Rayonnement de freinage : Bremsstrahlung

<http://steevespaces.free.fr/DATA/Particularit%E9s%20dosim%E9triques%20et%20de%20radioprotection,%20aspects%20fonctionnels.html>

Le pouvoir d'arrêt massique par collisions inélastiques est plus élevé pour les matériaux à faible numéro atomique que pour les matériaux à haut numéro atomique. En effet, le nombre d'électrons par unité de masse disponibles pour ce type d'interaction est plus faible pour les matériaux à haut numéro atomique, exprimée en $\text{MeV}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{cm}^{-2}$ (Perrot, 2011).

Sachant que l'équation de Bethe est valide seulement pour les électrons d'énergie suffisamment élevés, Raand et Wittry (1974) ont empiriquement extrapolé le pouvoir d'arrêt de Bethe (Bethe stopping power) à la région de basse énergie par l'adoption de la fonction parabolique $-dE/dS \propto E^{-1/2}$. Cette dernière fonction a été largement utilisée dans la simulation du processus de ralentissement des électrons lents (Joy 1987 ; Kotera 1989 ; Luo et al 1987 ; Newbury et al., 1990).

Toutefois cette approximation donne une dépendance en énergie à l'opposé des estimations prédites par la théorie de Lindhard pour le gaz d'électrons libre (Lindhard 1954, Ritchie et al. 1969), en plus d'une surestimation significative de la perte d'énergie pour les électrons de basse énergie (Ding et Shimizu., 1986).

I.5.4. Pouvoir d'arrêt par freinage

Selon Ervin.B.Podgorsak (2010), Le pouvoir d'arrêt par freinage est défini comme la perte de l'énergie cinétique de la particule chargée incidente par le processus collision avec les électrons atomique le long de son parcours

ΔE_c : L'énergie cinétique perdue lors de collision avec les électrons atomiques.

ΔX : la longueur du parcours de la particule incidente dans la matière.

$$S_c = \frac{\Delta E_c}{\Delta x} \quad (2)$$

*Structure et composants de
l'ADN*

II.1. Introduction

Le but de ce chapitre est de donner un aperçu sur l'interaction du rayonnement avec la matière qui est nécessaire pour comprendre l'effet biologique du rayonnement et sa variation avec la densité d'ionisation. Le centre d'intérêt dans notre étude est l'acide désoxyribonucléique à savoir les bases nucléiques.

La molécule d'ADN (l'acide désoxyribonucléique) contient toutes les informations nécessaires à la vie de tout organisme : humain, animal, bactérie, virus... (Francis, 2007). Elle est donc responsable de toutes les fonctions internes des organismes, étant donné qu'il code pour les ARN et les protéines. La pérennité de chaque espèce vivante est assurée par la stabilité et la fidélité de transmission de l'information génétique portée par l'ADN (Le Bihan, 2009). Dans cette partie on va présenter la structure de l'ADN.

II.2. Découverte de l'ADN

C'est au cours du XIXe et début du XXe siècle que les premiers travaux concernant les acides nucléiques sont apparus avec les découvertes de F. Miescher et de R. Altmann notamment (Devaux, 2020). En 1929, P. Levene découvre les désoxyriboses et que l'ADN est composé de quatre bases : l'adénine (A), la cytosine (C), la guanine (G), et la thymine (T). Plus tard, E. Chargaff publie des études concernant la composition de différents génomes et observe qu'il y a un pourcentage identique d'adénine et de thymine et un rapport également identique de guanine et de cytosine. A l'aide de ces résultats ainsi que des études de M. Wilkins et de R. Franklin qui s'appuient sur des résultats de diffraction de rayons X de cristaux d'ADN, en 1953 les chercheurs J. Watson et F. Crick rédigent la célèbre publication où ils décrivent la structure de la double hélice d'ADN. Cette dernière possède une symétrie de type C2 résultant d'un assemblage de deux chaînes en hélices qui sont en direction opposée. Ils établissent aussi un appariement des bases : A est associée avec T et C est appariée avec G. On retrouve également dans ce modèle que les bases sont espacées de 3,4Å et sont perpendiculaires à l'axe de rotation. Et enfin, le pas complet de la double hélice mesure 34Å et est formé de 10 bases (Devaux, 2020).

II.2. Structure et constituants de l'ADN

L'ADN est un polymère constitué de quatre nucléotides qui sont répétés de façon non aléatoire, donnant ainsi la séquence nucléotidique de l'ADN. Les nucléotides sont constitués de trois parties liées entre elles par une liaison covalente (Le Bihan, 2009). Chaque nucléotide est constitué d'une base azotée liée à un sucre, le désoxyribose, qui est lui-même lié à un groupe phosphate. Le groupement phosphate-désoxyribose constitue ce que l'on appelle le squelette de l'ADN. Au sein d'un même brin d'ADN, les nucléotides sont reliés par des liaisons covalentes entre le désoxyribose d'un nucléotide et le groupe phosphate du nucléotide suivant. (Tang, 2019) (voir figure 1) :

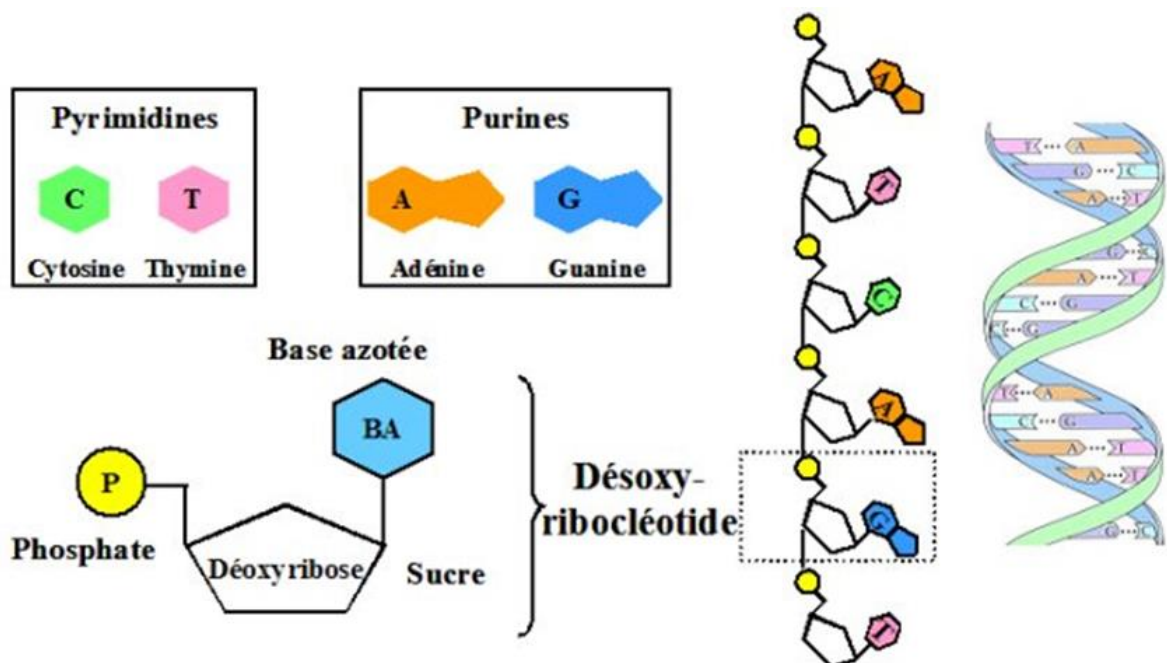


Fig.II.1. Représentation schématique de la composition chimique d'un nucléotide d'ADN

<https://www.exobiologie.fr/blog/2006/08/23/la-cellule-minimale-point-de-vue-du-biologiste/>

II.2.1. Désoxyribose

Le 2 -désoxyribose, sucre de l'ADN. Sa pour formule développée est $C_5H_{10}O_4$ (Victor, 2012). Il est lié à la base nucléique en position C1' par le biais d'une liaison N-glycosidique. (Devaux, 2020). Le ribose a pour formule $C_5H_{10}O_5$; il appartient à la famille des glucides (sucres) ou hydrates de carbone de formule $C_n(H_2O)_p$ (ici $n= p= 5$) (Victor, 2012) (voir figure 2) :

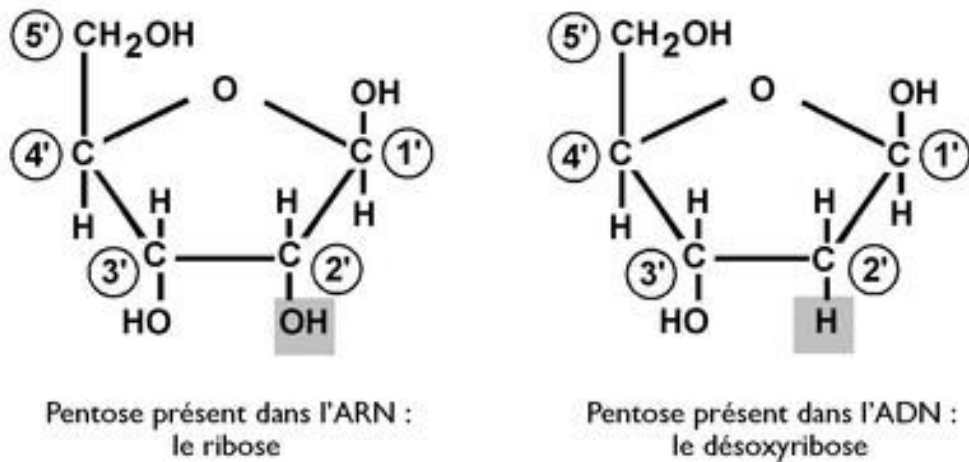


Fig.II.2. Représentation de le 2-désoxyribose et le ribose.

<https://monde.ccdmd.qc.ca/ressource/?id=55485&demande=desc>

Les différents nucléosides sont reliés entre eux par une liaison phosphodiester. La biosynthèse du poly nucléotide se fait *via* un mécanisme de polymérisation par des polymérases et implique les dérivés 5'-triphosphates des nucléosides (Devaux, 2020).

II.2.2. Bases azotées

Les bases azotées sont des molécules hydrophobes. De plus, leur cycle aromatique leur octroie une géométrie essentiellement plane. Cependant, comme pour les sucres, certains atomes les constituants peuvent s'écarter du plan défini par leur noyau aromatique. Or, la diversité de conformations accessibles à la molécule d'ADN n'est pas seulement liée à ces déformations du cycle aromatique mais correspond à la rotation de l'axe défini par la liaison Base-Sucre reliant l'atome C1' des bases azotées à un atome O du sucre désoxyribose (Brunet, 2015). Il existe quatre bases azotées de l'ADN, qui sont classées en deux types (Tang, 2019) (voir figure 3) :

- Les purines, correspondant aux bases adénine (A) et guanine (G).
- Les pyrimidines, comprenant les bases thymine (T) et cytosine (C).

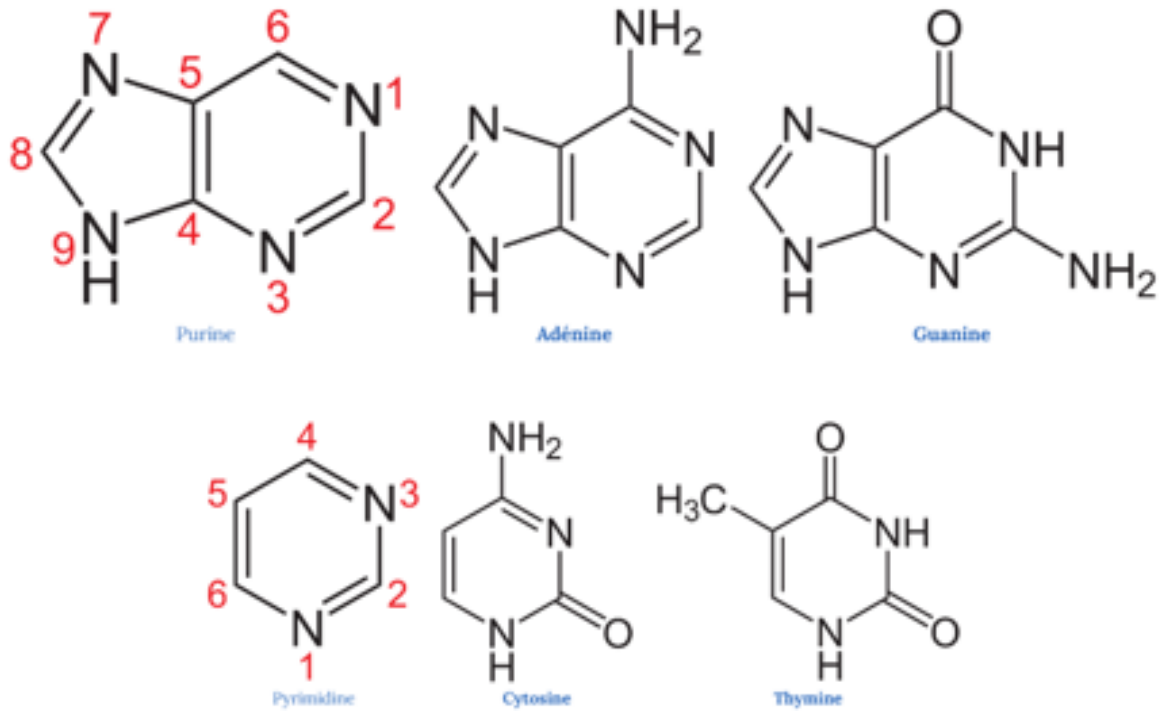


Fig.II.3. Représentation des bases azotées d'ADN.

https://www.wikiwand.com/fr/Base_azotée#/google_vignette

Ces quatre bases peuvent exister sous différentes formes tautomériques : céto/énol, amine/imine. Il est cependant largement admis que certaines formes sont largement prédominantes dans les conditions physiologiques. Dans les organismes évolués on trouve également en quantité moindre des bases modifiées comme la 5-méthylcytosine, la N⁶-méthyladénine, et la N⁴-méthylcytosine, qui sont formées par méthylation enzymatique des bases originelles (Labet, 2009).

II.2.3. Phosphate

Une molécule de phosphate se lie au sucre *via* une liaison phospho-ester O-C. En solution, un phosphate porte une charge élémentaire négative, due à l'ionisation d'un groupement OH, Ainsi chaque phosphate constituant un nucléotide laisse accessible un électron, ce qui confère un caractère négatif à la molécule d'ADN (Brunet, 2015), (Figure 4) :

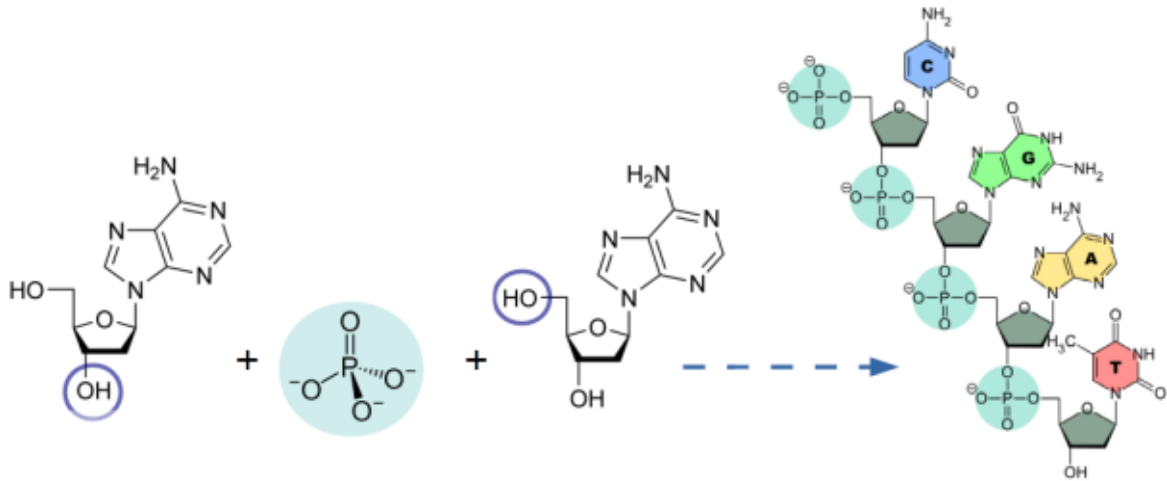


Fig.II.4. Représentation d'une molécule de phosphate et d'une molécule de sucre désoxyribose en interaction avec les autres constituants de l'ADN.

<http://sites.unice.fr/site/ffontaine/structurebio/co/chap6.html>

II.2.4. Bases complémentaires

L'ADN est en fait composé de deux brins antiparallèles se faisant face, l'extrémité 5' d'un brin faisant face à l'extrémité 3' de l'autre brin, et inversement. Ceci est possible car les nucléotides trouvés dans un brin possèdent des nucléotides complémentaires dans l'autre brin avec lesquels ils interagissent via des liaisons hydrogène, l'adénine étant complémentaire de la thymine, et la guanine étant complémentaire de la cytosine (Le bihan, 2009) (Figure 5) :

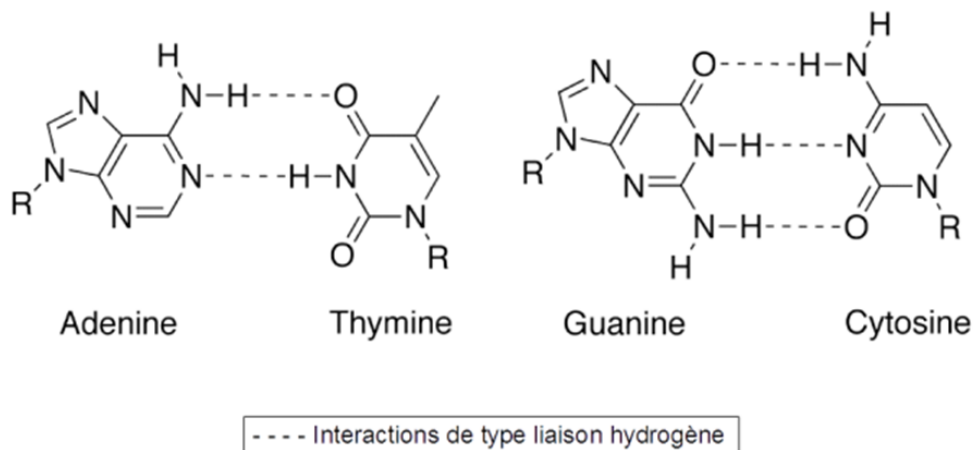


Fig.II.5. Représentation des bases azotées complémentaires des deux brins de l'ADN qui sont reliées entre elles par des liaisons hydrogène.

<http://sites.unice.fr/site/ffontaine/structurebio/co/chap5.html>

II.3. Double hélice

Le squelette de l'ADN, constitué de l'enchaînement de molécules de sucre et de phosphates, est essentiellement hydrophile. Tandis que les bases azotées, fixées au sucre, sont hydrophobes. Les phosphates tendent à adopter un arrangement où ils sont préférentiellement accessibles aux molécules d'eau, donc orientés vers l'extérieur de la chaîne. De plus, le volume correspondant à l'encombrement stérique des bases est inférieur à la distance maximale entre les bases. Cette distance maximale correspond à la distance entre l'empilement des paires de bases qui apparaît dans la représentation de l'ADN (Brunet, 2015), (Figure 6) :

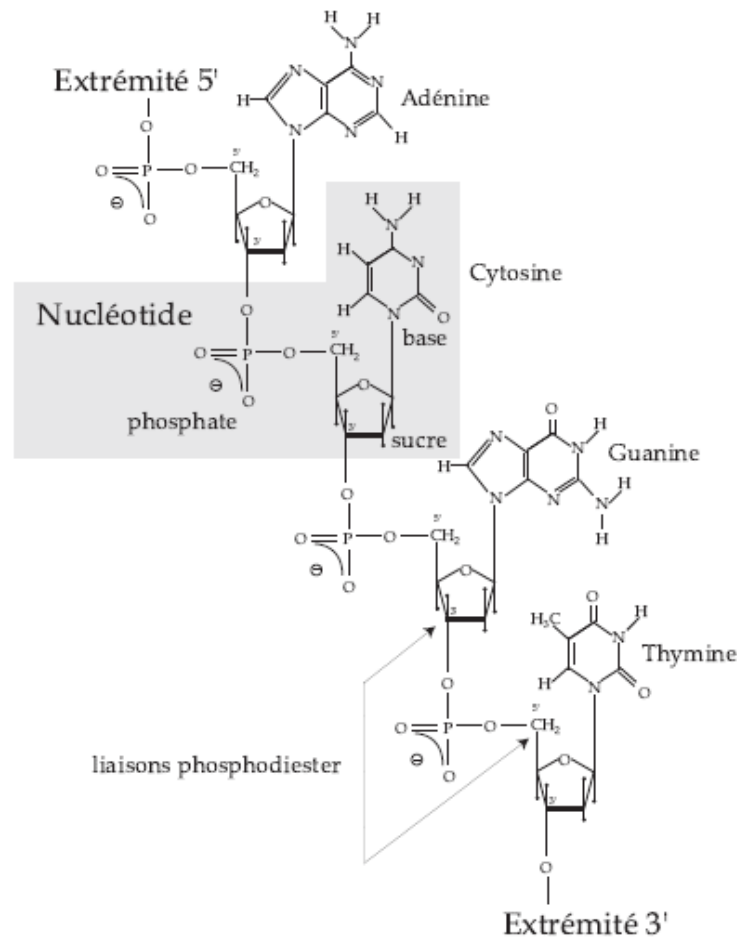


Fig.II.6. Structure chimique d'un simple brin d'ADN (LeGrand, 2005)

Bien que l'ADN existe majoritairement sous forme de double hélice, on le retrouve également sous la forme simple brin (ADNss). Dans les cellules eucaryotes notamment, des mécanismes de réplication, de recombinaison et de réparation nécessitent la formation d'un intermédiaire simple brin de l'ADN (Shereda et *al.*, 2008)

Il existe trois grandes structures de double hélice dissociables de par leurs paramètres structuraux (Brunet, 2015), (Figure 7). L'ADN B, qui est la forme la plus connue de l'ADN, et

qui présente un grand et un petit sillon. L'ADN A, qui correspond à la forme de l'ADN quand celui-ci est apparié à un ARN lors de la transcription, ou lorsque l'on déshydrate la forme B de l'ADN. L'ADN Z, seule forme de l'ADN à posséder une hélice gauche, relativement rare dans l'ADN et dont la fonction est encore floue. De plus, l'ADN peut prendre d'autres formes, telles que des triples hélices et des quadruplexes. (Le Bihan, 2009), Principales variations des paramètres structuraux des formes de l'ADN représenté dans le tableau 1 :

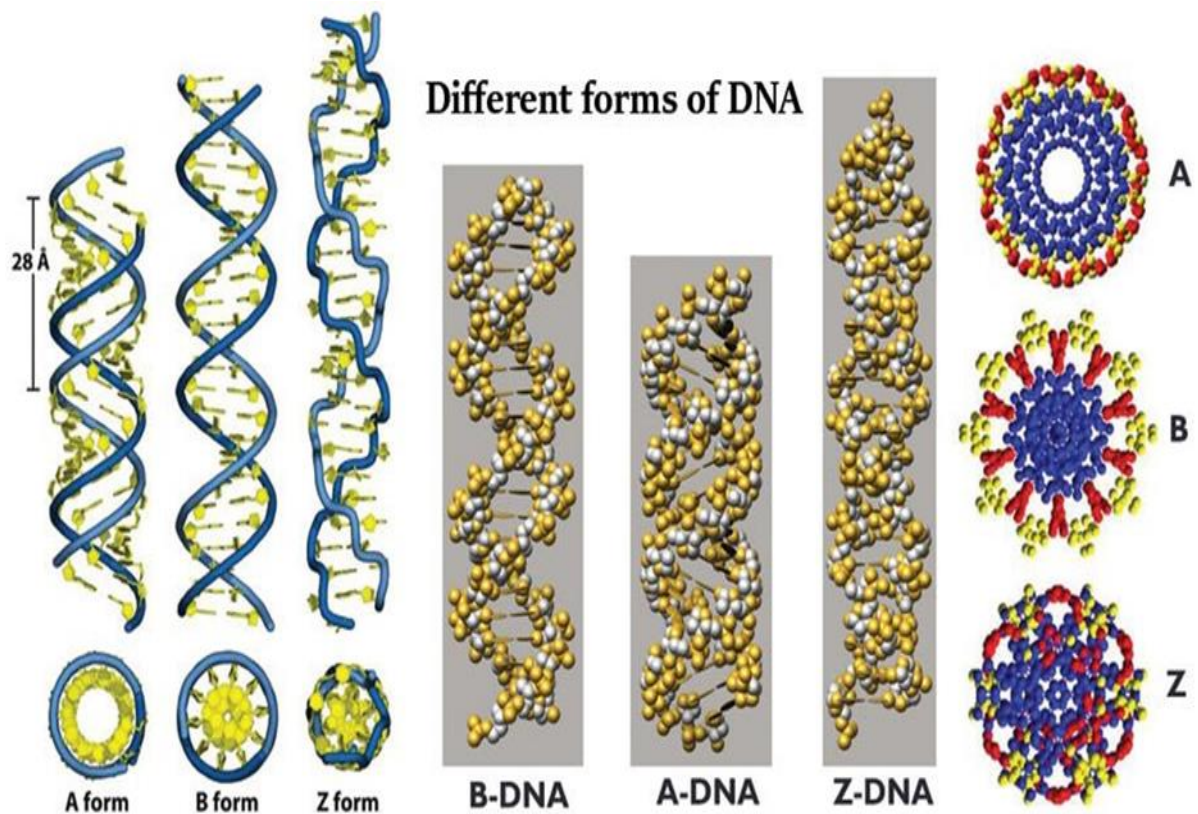


Fig.II.7. Représentation des principales formes de double hélice de l'ADN.

<https://microbenotes.com/different-forms-of-dna-b-form-a-form-z-form/>

Tableau II.1. Comparaison des propriétés structurales des ADNs A,B et Z. (Brunet, 2015)

Caractéristique	Forme B	Forme A	Forme Z
Spécificité de la séquence	non spécifique	non spécifique	riche en C,G
Orientation de l'hélice	droite	droite	gauche
Unité structurale	1 bp	1 bp	2 bp
Conformation du sucre	C _{2'} -endo	C _{3'} -endo	C → C _{2'} -endo G → C _{3'} -endo
Distance axiale entre les bases	0.23 nm	0.23 nm	0.38 nm
Diamètre de l'hélice	2.4 nm	2.6 nm	1.8 nm
Angle de basculement des bases par rapport à l'axe de l'hélice	~ 0°	~ 19°	~ -9°
Nombre de pb par tour d'hélice	10.5 pb	11 pb	12 pb
Pas de l'hélice	3.4 nm	2.9 nm	4.5 nm
Paramètres du Grand sillon :			
Largeur	1.17	0.27	∅
Profondeur	0.85	1.35	∅
Paramètres du Petit sillon :			
Largeur	0.57	1.10	0.40
Profondeur	0.75	0.28	0.90

II.4. Grand et petit sillons

Le point d'attache entre la molécule de sucre et les bases azotées n'est pas symétrique par rapport à cet axe de référence. Dans le plan des paires de base cela conduit à des domaines spatiaux délimités par ces points d'attaches. Ces domaines sont plus grands d'un côté que de l'autre, ce qui correspond respectivement au grand sillon et au petit sillon de la molécule d'ADN (Brunet, 2015). (Figure 8) :

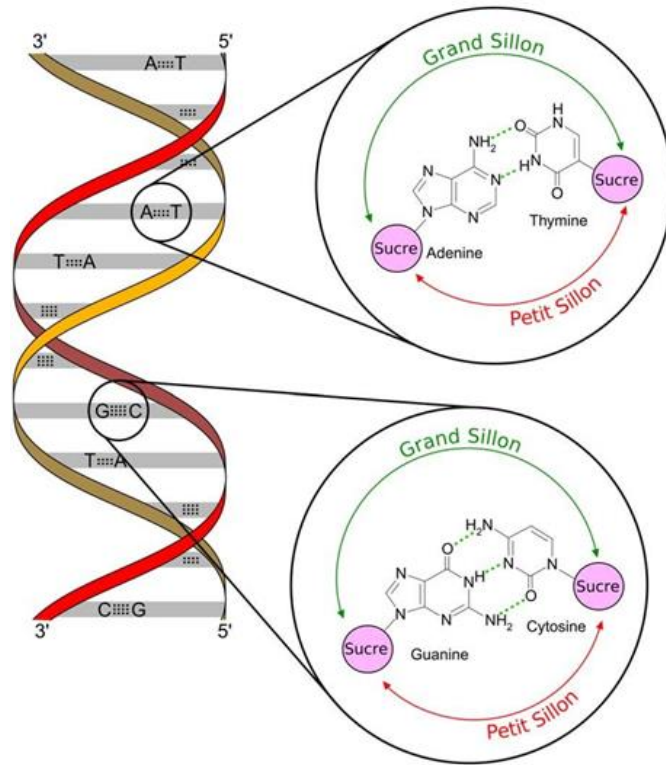


Fig.II.8. Représentation du grand et du petit sillon d'ADN.

https://www.researchgate.net/figure/Fig-A6-Structure-de-lADN-en-double-helice-La-structure-de-lADN-est-stabilisee-par_fig50_281532545

II.5. Impact radiobiologique

L'ADN peut être modifié par des agents physiques (rayonnements UV, γ ...) ou chimiques (agents alkylants, oxydants...) d'origine endogène et exogène, amenant des modifications chimiques sur sa structure (Le Bihan, 2009). Les effets biologiques des rayonnements ionisants sont essentiellement dus aux dommages causés à l'ADN des cellules bien que des dommages sur d'autres sites cellulaires puissent entraîner la mort cellulaire. Les dommages au niveau de l'ADN peuvent être produits suivant deux voies : les dommages directs et les dommages indirects (Perrot, 2011).

Les trois principales modifications sur l'ADN correspondent à des hydrolyses, des alkylations et des oxydations, qui peuvent intervenir à différents niveaux des bases nucléiques et du squelette phosphate-sucre de l'ADN (Le Bihan, 2009), (Figure 9) :

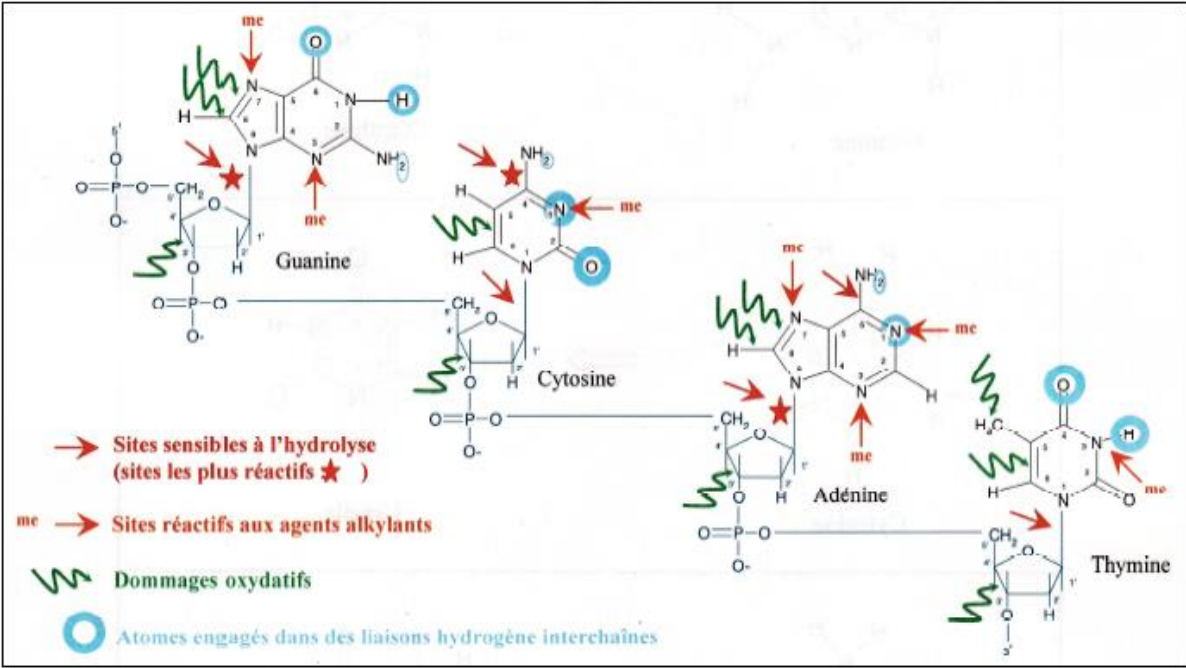


Fig.II.9. Principaux sites de modifications sur l'ADN (Le Bihan, 2009)

Matériels et méthodes

III.1. Introduction

Lorsqu'un faisceau d'électrons mono-énergétique pénètre dans un échantillon solide, il subit un certain nombre d'interactions, élastiques et inélastiques. Les interactions élastiques, principalement avec les centres diffuseurs, induisent des variations plus ou moins brutales de la direction des électrons incidents sans perte d'énergie. Ces interactions sont aussi appelées communément « diffusions élastiques » (Chelda, 2010).

La section efficace élastique est définie comme étant la probabilité d'interaction en unité de surface par particule cible pour une particule incidente d'interagir avec la particule cible (Lemelin, 2019).

Il existe plusieurs types de sections efficaces élastiques. Le premier type et le plus intuitif est la SE totale. Elle représente la probabilité pour l'électron d'interagir avec tous les processus confondus. La section efficace élastique totale est donc la somme des sections efficaces élastiques de tous les processus d'interactions possibles ($\sigma = \sum \sigma_{rr}$). Le deuxième type est la SE différentielle correspondant à la probabilité d'interaction par unité d'angle solide à un angle donné. En outre, la SE différentielle peut aussi représenter la probabilité d'interaction par unité d'énergie. À l'opposé, la SE intégrale est la probabilité d'interaction différentielle (SE différentielle) intégrée sur tout l'espace (ou sur l'énergie). Le dernier type se nomme la SE absolue et elle correspond à la probabilité d'interaction pour une seule collision (ou une interaction) entre l'électron et la molécule (Lemelin, 2019).

Les collisions élastiques ont été négligées dans le cas des protons. Mais dans le cas des électrons elles sont importantes et deviennent dominantes dans le domaine des basses énergies. Il existe plusieurs modèles semi empiriques pour les calculs des collisions élastiques. Ces modèles coïncident, plus ou moins, avec les données expérimentales suivant les domaines d'énergie de l'électron incident. Par exemple, la formule proposée par Brenner et Zaidler (1983) [BRE83], est applicable pour des électrons dont l'énergie cinétique est plus faible que 200 eV (Francis, 2007).

III.2. Calcul de sections efficaces élastiques

Dans la simulation de Monte Carlo de la diffusion élastique de l'électron, on utilise la section efficace relativiste. Cette dernière est calculée par la résolution de l'équation de Dirac en utilisant la méthode de l'onde partielle (PWEM) (Azli, 2010).

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).

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

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) :

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

III.2.1. Sections efficaces élastiques avec les atomes et avec les molécules

Il est possible de mesurer ou d'obtenir différentes combinaisons de types de SEs. Par exemple, il est possible de mesurer des sections efficaces différentielles et totales. Ces SEs représentent donc la probabilité d'interaction de l'électron avec la molécule à un angle solide donné pour tous processus confondus. De plus, il est possible de mesurer des sections efficaces différentielles absolues et intégrales qui correspondent à la probabilité d'interaction entre l'électron et la molécule pour un seul processus d'interaction pour tous les angles (Lemelin, 2019).

III.2.2. Sections efficaces des collisions élastiques avec les 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).

III.2.3. L'analyse relativiste de Dirac des ondes partielles

Les potentiels utilisés dans les calculs des sections efficaces de collisions élastiques peuvent être classés en : (Salvat et *al.*, 2005)

- Potentiels résultant du modèle statistique de l'atome, c'est-à-dire le potentiel de Thomas–Fermi (TF) ou le potentiel de Thomas – Fermi – Dirac (TFD) et Potentiels de Thomas–Fermi–Molière (TFM) (Salvat et *al.*, 2005), La théorie de la fonctionnelle de la densité prend sa source dans le modèle de l'atome élaboré par Thomas et Fermi dans les années 1920 (FERMI, 1928), et complété par Dirac dans les années 1930 (DIRAC, 1930).
- Potentiels dérivés pour les atomes des méthodes relativistes ou non relativistes auto-cohérentes de Hartree – Fock, par exemple, le potentiel relativiste de Dirac–Hartree – Fock-Slater (DHFS) considéré dans le présent travail (Salvat et *al.*, 2005). Appelée aussi parfois approximation de champ moyen. Elle ne traite pas de manière très satisfaisante la corrélation électronique mais nous allons la présenter car elle est à la base de nombreuses méthodes de chimie quantique modernes plus « exactes » (Labet, 2009).

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, 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'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 ;

$$V_{ex}(r) = \frac{1}{2}[E - V_{st}(r)] - \frac{1}{2}\{[E - V_{st}(r)]^2 + 4\pi\alpha_0 e^4 \rho(r)\}^{1/2} \quad (7)$$

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

$$V_{cp}(r) = -\frac{\alpha_d e^2}{2(r^2 + d^2)^2} \quad (8)$$

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) ;

$$d^4 = \frac{1}{2}\alpha_d a_0 Z^{-1/3} b_{pol}^2 \quad (9)$$

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

$$b_{pol}^2 = \max\{(E - 50\text{eV})/(16\text{eV}), 1\} \quad (10)$$

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

$$\frac{d\sigma_i^{el}}{d\theta} = |F_l(\theta)|^2 + |G_l(\theta)|^2 \quad (11)$$

Où

$$F_l = \frac{1}{2iK} \{(l+1)[\exp(2i\delta_{l+}) - 1] + l[\exp(-2i\delta_{l-}) - 1]\} P_l(\cos\theta) \quad (12)$$

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

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 et al., 2005).

$$k^2 = E(E + 2c^2)/c^2 \quad (14)$$

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

$$\sigma_i^{el} = \int_0^\pi \frac{d\sigma_i^{el}}{d\theta} d\Omega \quad (15)$$

En conséquence, la section efficace de transport élastique atomique σ_i^{tr} est calculée à l'aide de l'équation

$$\sigma_i^{tr} = \int_0^\pi \frac{d\sigma_i^{el}}{d\theta} (1 - \cos\theta) d\Omega \quad (16)$$

III.3. Sections efficaces des collisions élastiques avec les molécules

Les sections efficaces moléculaires sont calculées à partir des données atomiques en appliquant une addition cohérente, connue sous le nom de règle d'additivité (AR). Dans cette approximation, l'amplitude de diffusion moléculaire peut être déduite de la somme de toutes les amplitudes atomiques pertinentes, conduisant ainsi aux sections efficaces différentielles élastiques moléculaires de la cible en question (Aouina, 2020).

III.3.1. Méthode des règles d'additivité avec correction d'écran (SCAR)

La méthode SCAR (Screened Corrected Additivity Rule) permet de prendre en compte les interactions entre l'électron et la molécule dans son ensemble a été appliquée, étendant ainsi la validité aux énergies plus basses (Bordes, 2017).

Pour calculer les sections efficaces élastiques totales pour la diffusion des électrons et des positrons 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 (Aouina, 2020).

III.4. Libre parcours moyen élastique de l'électron

La distance moyenne entre deux collisions élastiques est le libre parcours moyen élastique (Bichsel, 1988), 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 (Wagner et *al.*, 1980). Est défini par Bauer (Bichsel, 1988).

$$\lambda_e = \frac{1}{\sigma_T N} \quad (17)$$

σ_T Section efficace différentielle de diffusion élastique

N Nombre d'atomes du système : $N = N_A \rho / A$

Nombre d'Avogadro

ρ = densité,

A = masse atomique

Résultats et discussions

IV. Résultats et discussions

IV.1. Sections efficaces élastiques

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.

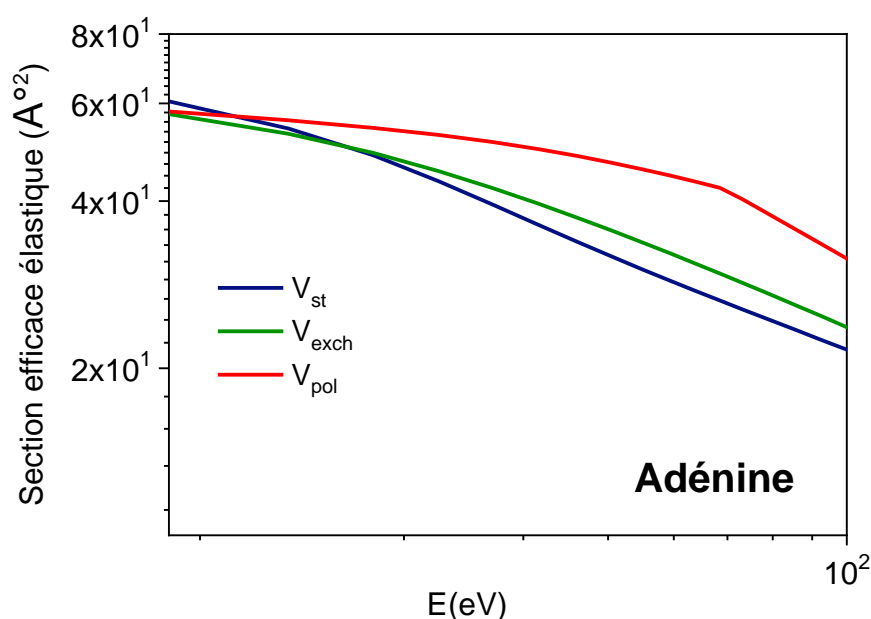


Fig.IV.1. Sections efficaces élastiques des électrons de l'adénine pour différents potentiels d'interaction

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

Les figures de 2 à 5 représentent les variations des sections efficaces des collisions élastiques des électrons avec les bases nucléiques comparées avec d'autres données théoriques disponibles dans la littérature dans la gamme d'énergie de 10 eV à 100 keV.

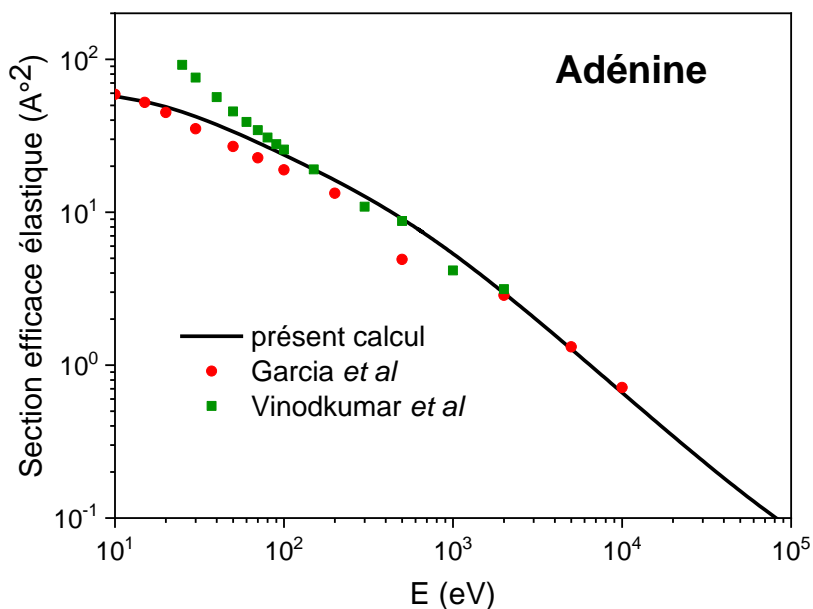


Fig.IV.2. Sections efficaces élastiques des électrons de l'adénine comparées avec les sections efficaces élastiques des électrons de Blanco et Garcia (2007), Vinodkumar *et al.* (2014)

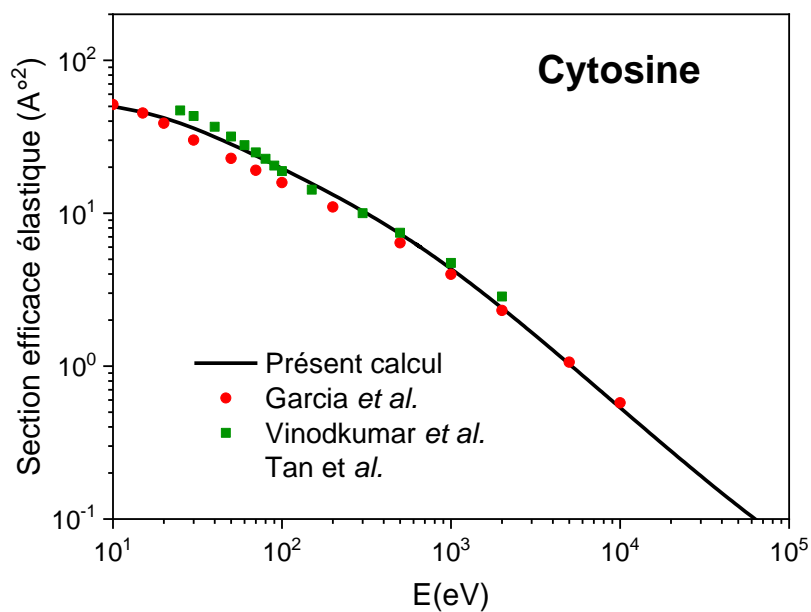


Fig.IV.3. Sections efficaces élastiques des électrons de la cytosine comparée avec les sections efficaces élastiques des électrons de Blanco et Garcia (2007), Vinodkumar *et al.* (2014)

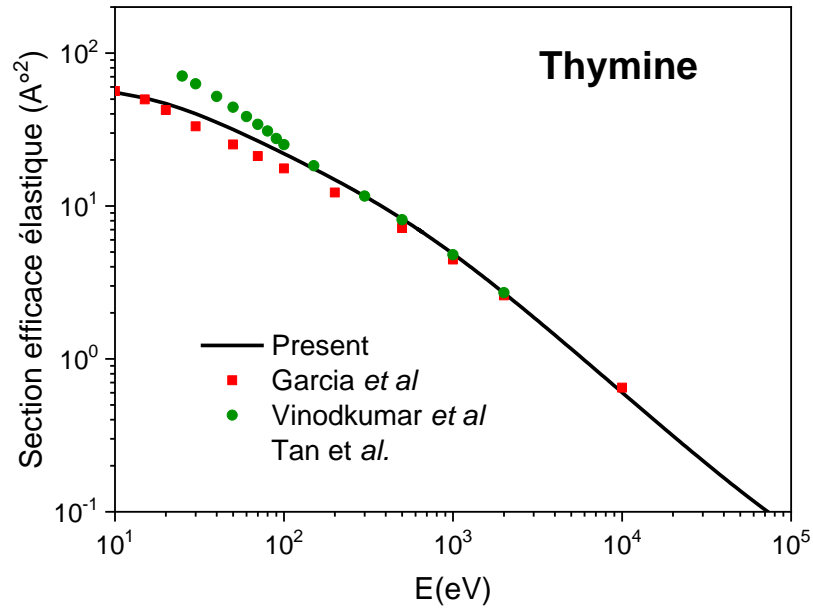


Fig.IV.4. Sections efficaces élastiques des électrons de la thymine comparées avec les sections efficaces élastiques des électrons Blanco et Garcia (2007), Vinodkumar et al. (2014)

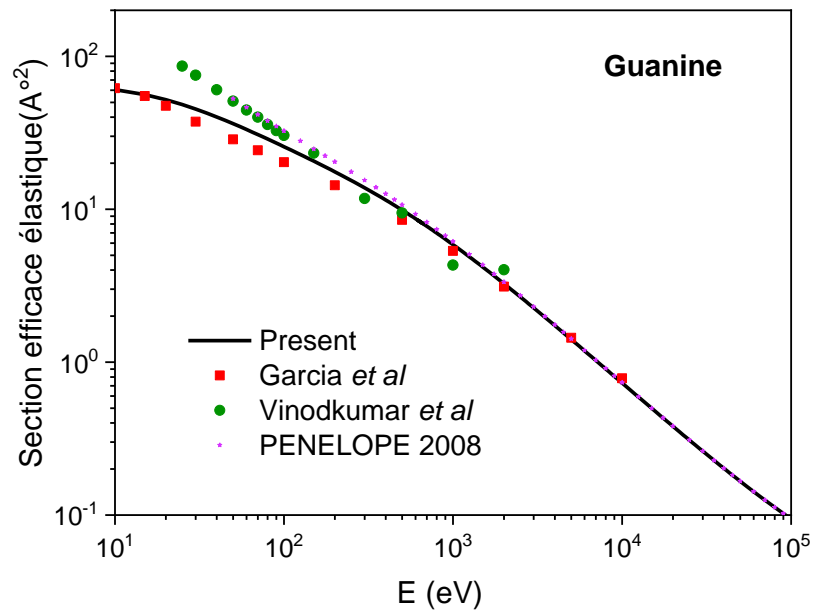


Fig.IV.5. Sections efficaces élastiques des électrons de la guanine comparée avec les sections efficaces élastiques des électrons de Blanco et Garcia (2007), Vinodkumar et al. (2014), Penelope (2008)

Les figures montrent que les valeurs des sections efficaces calculées diminuent avec l'augmentation de l'énergie alors que les valeurs théoriques des sections efficaces élastiques de Blanco et al. (2007) sont en bon accord avec nos résultats sur presque toute la gamme d'énergie. Les sections efficaces élastiques calculées de Blanco et de Garcia (2007) sont différentes de nos sections efficaces élastiques pour les électrons. Elles sont basées sur la même règle d'additivité avec correction d'écran que celle utilisée dans la présente étude, mais utilisent l'équation de Schrödinger, comme c'est mentionné avant, dans la dérivation des sections efficaces élastiques différentielles (Aouina, 2020).

Les valeurs théoriques des sections efficaces élastiques de Vinodkumar et al. (2014) sont supérieures à nos résultats pour des énergies inférieures à 102 eV. Au-delà de cette énergie, les résultats actuels sont en très bon accord avec ceux de Vinodkumar et al. (2014). Les données de Vinodkumar et al. (2014) sont basées sur une approche possible pour l'estimation des sections efficaces d'excitation rotationnelle induite par les dipôles qui consiste à approximer la molécule cible par un dipôle électrique libre dans le cadre de la première approximation de Born proposée par Jain et al. (1986, 1987, 1988) qui utilise l'équation de Schrödinger et le potentiel sphérique de la molécule, notamment le potentiel d'échange et de polarisation (Aouina, 2020).

Pour la guanine, les sections efficaces élastiques calculées sont comparées en plus avec les valeurs théoriques des sections efficaces élastiques de Penelope (2008). Comme le montre la figure 5, les deux résultats sont en excellent accord sur toute la gamme d'énergie.

Les courbes montrent clairement que les résultats actuels des sections efficaces élastiques pour les électrons trouvent un excellent accord avec les résultats de Blanco et de Garcia (2007) sur l'ensemble des énergies supérieures à 100 eV. Les sections efficaces atomiques utilisées dans notre modèle sont calculées à l'aide d'une analyse relativiste aux ondes partielles de Dirac (Salvat et al., 2005).

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.

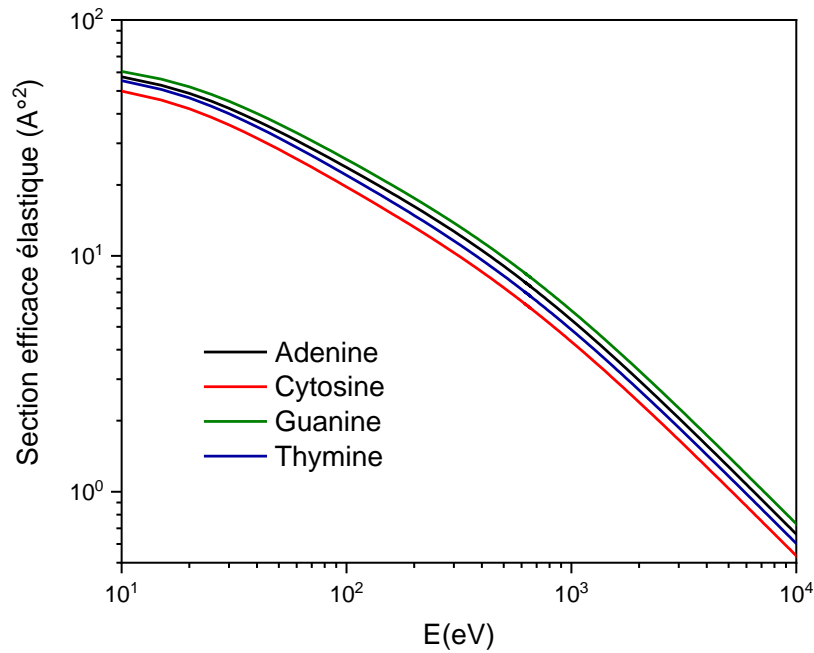


Fig.IV.6. Sections efficaces des collisions élastiques des électrons avec les bases nucléiques (adénine, cytosine, guanine et thymine) respectivement.

La figure montre un comportement similaire des sections efficaces des collisions élastiques des électrons avec les bases nucléiques (adénine, cytosine, guanine et thymine) respectivement. Ce qui montre que même pour différentes compositions chimiques mais ils ont le même comportement *vis-à-vis* un rayonnement.

IV.2. 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.

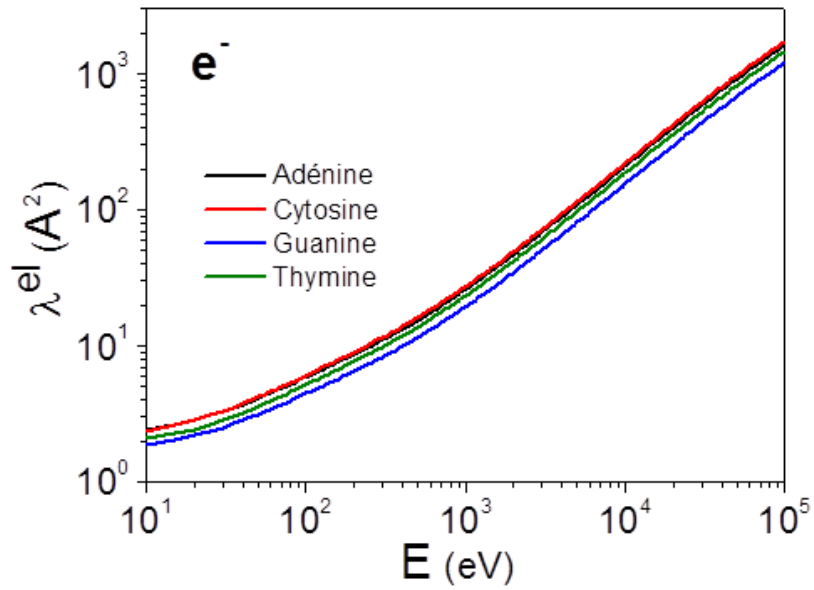


Fig.IV.7. Libre parcours moyens des collisions élastiques des électrons avec les bases nucléiques (adénine, cytosine, guanine et thymine) respectivement.

Cette figure montre que libre parcours moyens des collisions élastiques des électrons avec les bases nucléiques (adénine, cytosine, guanine et thymine) 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.

Conclusion générale

Conclusion générale

Dans ce travail, nous avons étudié les collisions d'électrons avec des molécules biologiques : adénine, cytosine, guanine et thymine, pour calculer les sections efficaces élastiques différentielles et le libre parcours moyens des collisions élastiques des électrons avec les bases nucléiques d'une manière simple, ce qui donne des sections efficaces élastiques en accord avec les données mesurées citées dans la littérature.

Les sections efficaces calculées à l'aide de l'analyse des ondes partielles de Dirac pour les atomes, puis à l'aide de la méthode SCAR (une correction d'écran géométrique) où l'effet d'écran est important à basse et moyenne énergie pour les molécules.

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.

Pour les collisions élastiques, les sections efficaces sont de valeurs importantes pour la gamme de l'énergie de 10^2 eV à 10^4 eV.

Les résultats de ce travail montrant que pour différentes compositions chimiques : le comportement *vis-à-vis* un rayonnement, il est le même : les sections efficaces des collisions élastiques des électrons avec les bases nucléiques (adénine, cytosine, guanine et thymine) à un comportement similaire.

Le libre parcours moyen des collisions élastiques des électrons avec les bases nucléiques (adénine, cytosine, guanine et thymine) augmente avec l'augmentation de l'énergie incidente.

Références bibliographiques

- Aouina, N.Y. (2020). Simulation Monte Carlo du passage d'électrons énergétiques dans l'ADN et l'eau.
- Askri, B. (2002). Etude des interactions d'un faisceau d'électrons d'énergie de 10 MeV et de matière ; Etude des interactions d'un faisceau d'électrons de 10 MeV d'énergie avec la matière.
- Azli, T. (2010). Calcul de l'énergie déposée des particules chargées dans la matière (Doctoral dissertation, Université Ferhat Abbas–SETIF).
- Bichsel, H. (1988). Straggling in thin silicon detectors. *Reviews of Modern Physics*, 60(3), 663.
- 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).
- Bourouis, N., & Boucenna, S. (2020). Evaluation dosimétrique de la stéréotaxie cérébrale avec un LINAC (accélérateur) par simulation Monte-Carlo (Doctoral dissertation, University of Jijel).
- Brunet, A. (2015). Etude à l'échelle de la molécule unique des changements conformationnels de la molécule d'ADN. Influence de la présence de défauts locaux présents sur l'ADN et de paramètres physico-chimiques de la solution environnante (Doctoral dissertation, Université de Toulouse, Université Toulouse III-Paul Sabatier).
- Devaux, A. (2020). Conception et application d'ADN tétraplexe à topologie contrôlée (Doctoral dissertation, Université Grenoble Alpes [2020-...]).
- Ding, Z. J., & Shimizu, R. (1996). A Monte Carlo modeling of electron interaction with solids including cascade secondary electron production. *Scanning the Journal of Scanning Microscopies*, 18(2), 92-113.
- Dirac, P. A. (1930, July). Note on exchange phenomena in the Thomas atom. In *Mathematical proceedings of the Cambridge philosophical society* (Vol. 26, No. 3, pp. 376-385). Cambridge University Press.
- Drake, G. W. (Ed.). (2006). *Springer handbook of atomic, molecular, and optical physics*. Springer Science & Business Media.
- Farah, K. (2009). Etudes spectroscopiques des verres irradiés: Application en dosimétrie nucléaire (Doctoral dissertation, Université de Monastir (Tunisie)).
- Federighi, M. (2019). Les rayonnements ionisants comme méthode de préservation des aliments: État de l'art. *Rev. Med. Vet*, 4-6.
- Fermi, E. (1928). Sulla deduzione statistica di alcune proprietà dell'atomo. Applicazione alla teoria del sistema periodico degli elementi. *Rend. Lincei*, 7, 342.

- 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).
- Garnier, N. (2018). Simulation d'un accélérateur linéaire d'électrons à l'aide du code Monte-Carlo PENELOPE: métrologie des traitements stéréotaxiques par cônes et évaluation de l'algorithme eMC (Doctoral dissertation, Université Côte d'Azur).
- Gillard, N. (2005). Effets des radiations ionisantes sur des complexes ADN-protéine (Doctoral dissertation, Université d'Orléans).
- Jablonski, A., Salvat, F., & Powell, C. J. (2005). Evaluation of elastic-scattering cross sections for electrons and positrons over a wide energy range. *Surface and Interface Analysis: An International Journal devoted to the development and application of techniques for the analysis of surfaces, interfaces and thin films*, 37(12), 1115-1123.
- Kanaya, K. A., & Okayama, S. (1972). Penetration and energy-loss theory of electrons in solid targets. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 5.
- Labet, V. (2009). Etude Théorique de Quelques Aspects de la Réactivité des Bases de l'ADN- Définition de nouveaux outils théoriques d'étude de la réactivité chimique (Doctoral dissertation, Université Joseph-Fourier-Grenoble I).
- Le Bihan, Y. V. (2009). Étude structurale et fonctionnelle de la reconnaissance et de la métabolisation de lésions puriques et pyrimidiques dans l'ADN par la Formamidopyrimidine-ADN glycosylase (Doctoral dissertation, Université d'Orléans).
- Le Loirec, C. (2007). Simulation Monte Carlo de suivi de positrons dans la matière biologique: applications en imagerie médicale (Doctoral dissertation, Université Paul Verlaine-Metz).
- Lemelin, V., Ayotte, P. P., & McBreen, P. P. (2019). Mesure de sections efficaces absolues vibrationnelles et électroniques pour la collision d'électrons de basse énergie avec des constituants de l'ADN en phase condensée.
- Nadia, B. (2016). Application de la méthode de Monte Carlo à l'étude de l'interaction rayonnement-matière codes TRIM et Casino.
- Najjar, S. (1992). Etude de dispositifs A-Si: H par une méthode EBIC à énergie variable (Doctoral dissertation).
- Perrot, Y. (2011). Evaluation de la dose déposée par des faisceaux d'électrons en radiothérapie dans des fantômes voxélisés en utilisant la plateforme de simulation Monte Carlo GATE fondée sur Geant4 dans un environnement de grille (Doctoral dissertation, Université Blaise Pascal-Clermont-Ferrand II).
- Podgoršak, E. B. (2006). *Radiation physics for medical physicists* (Vol. 1). Berlin: Springer.
- Regulus, P. (2006). Détection, caractérisation et mesure d'un nouveau dommage radio-induit de l'ADN isolé et cellulaire (Doctoral dissertation, Université Joseph-Fourier-Grenoble I).

- Salvat, F. (2003). Optical-model potential for electron and positron elastic scattering by atoms. *Physical Review A*, 68(1), 012708.
- 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.
- Shereda, R. D., Kozlov, A. G., Lohman, T. M., Cox, M. M., & Keck, J. L. (2008). SSB as an organizer/mobilizer of genome maintenance complexes. *Critical reviews in biochemistry and molecular biology*, 43(5), 289-318.
- Soum, G., Mousselli, A., Arnal, F., & Verdier, P. (1987). Etude de la transmission et de la rétrodiffusion d'électrons d'énergie 0, 05 à 3 MeV dans le domaine de la diffusion multiple. *Revue de physique appliquée*, 22(10), 1189-1209.
- Tang, N. (2019). Évaluation, à partir de modélisations nanodosimétriques, de l'influence de la compaction de la chromatine sur les effets radio-induits précoces et extension aux effets tardifs (réparation des dommages à l'ADN et mort cellulaire) (Doctoral dissertation, Bordeaux).
- Terrissol, M., & Patau, J. P. (1978). Simulation du transport d'électrons rapides dans des cibles minces d'aluminium par une méthode de Monte Carlo. *Journal de Physique*, 39(2), 189-193.
- Wagner, C. D., Davis, L. E., & Riggs, W. M. (1980). The energy dependence of the electron mean free path. *Surface and Interface Analysis*, 2(2), 53-55.
- Walker, D. W. (1971). Relativistic effects in low energy electron scattering from atoms. *Advances in Physics*, 20(85), 257-323.
- Wehenkel, C. (1975). Mise au point d'une nouvelle méthode d'analyse quantitative des spectres de pertes d'énergie d'électrons rapides diffusés dans la direction du faisceau incident: application à l'étude des métaux nobles. *Journal de Physique*, 36(2), 199-213.
- Zeller, C., & Ruste, J. (1976). Modèle théorique de pénétration des électrons dans la matière. *Revue de Physique Appliquée*, 11 (4), 441-447.
- Zouckermann, R. (1957). La diffusion élastique des électrons. *J. Phys. Radium*, 18(2), 133-137.

ملخص

يقدم هذا العمل عرضاً عن بنية الحمض النووي ومكوناته المختلفة ويظهر تأثير تفاعل الإشعاع المؤين على المادة البيولوجية. الدراسة الحالية مخصصة لحساب المقاطع العرضية المرنة لتشتت الإلكترون الكلي مع قواعد الحمض النووي (الأدينين والثايمين والسيتوزين والجوانين) باستخدام طريقة قواعد الجمع مع تصحيح الشاشة (SCAR) من 10 فولت إلى 100 كيلو فولت. تتم مقارنة نتائجنا مع البيانات النظرية الأخرى المتوفرة في الأدبيات. يوفر هذا العمل أيضاً نتائج حول متوسط المسار الحر للتصادمات المرنة للإلكترونات مع القواعد النووية.

الكلمات المفتاحية: الحمض النووي، الأدينين، الثايمين، السيتوزين، الجوانين، الاصطدام المرن، المقاطع العرضية المرنة للإلكترونات، SCAR.

Résumé

Ce travail donne une présentation sur la structure de l'ADN et ses différents constituants et montre l'effet de l'interaction du rayonnement ionisant sur matière biologique. La présente étude est consacré au calcul des sections efficaces élastiques de diffusion totale d'électron avec les bases de l'ADN (adénine, thymine, cytosine et guanine) à l'aide de la méthode des règles d'additivité avec correction d'écran (SCAR) de 10 eV à 100 KeV. Nos résultats sont comparés avec d'autre données théoriques disponibles dans la littérature. Ce travail fournit de même des résultats sur le libre parcours moyen des collisions élastiques des électrons avec les bases nucléiques.

Mots clés : ADN, adénine, thymine, cytosine, guanine, collision élastique, sections efficaces élastiques des électrons, SCAR.

Abstract

This work gives a presentation on the structure of DNA and its different constituents and shows the effect of the interaction of ionizing radiation on biological matter. The present study is devoted to the calculation of the elastic cross sections of total electron scattering with the bases of DNA (adenine, thymine, cytosine and guanine) using the method of additivity rules with screen correction. (SCAR) from 10 eV to 100 KeV. Our results are compared with other theoretical data available in the literature. This work also provides results on the mean free path of elastic collisions of electrons with nucleic bases.

Key words: DNA, adenine, thymine, cytosine, guanine, elastic collision, elastic cross sections of electrons, SCAR.