

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE
UNIVERSITÉ MOULOU D MAMMERI DE TIZI OUZOU



FACULTÉ DES SCIENCES
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE

MÉMOIRE DE MASTER

Filière : Physique
Spécialité : Nano physique

Présenté par
Ait Ammar Nouara

Thème

**Calcul des sections efficaces différentielles et intégrales de
la diffusion élastique du cytosine.**

Devant le jury d'examen composé de :

ZIANE Abdelhamid	Professeur	U.M.M.T.O	Président
MEGCHICHE El Hocine	Professeur	U.M.M.T.O	Examineur
MOKRANI Saida	Maître de conférences	U.M.M.T.O	Rapporteur

Soutenu publiquement le : 03/09/2020

Remerciement

Je remercie tout d'abord ALLAH le tout puissant, pour m'avoir donnée la force et la patience, la santé et la volonté pour réaliser ce modeste travail.

Je remercie mes chers parents qui m'ont aidé à être ce que je suis et qui m'ont entouré avec leur amour et affection. Je remercie leur dévouement, leur consacre de temps et leur présence constante au cours de toutes ces années d'étude. Je ne pourrais jamais les remercier assez pour leur bien. Je vous aime...

Je témoigne une immense reconnaissance à madame Saida Mokrani, mon encadreur au laboratoire de mécanique, structure et énergétique de l'université Mouloud MAMMERY de tizi-ouzou pour m'avoir orientée dans l'établissement de ce rapport de mémoire. Je la remercie également d'avoir cru en moi ainsi qu'en mes capacités de mener à bien ce travail.

J'adresse toute ma gratitude au professeur Abdelhamid Ziane pour avoir accepté de présider le jury de cette soutenance et de juger ce travail. Que le professeur El hocine Megchiche trouve mes remerciements les plus vifs pour avoir accepté d'examiner ce travail et le rehausser ainsi par ses remarques et suggestions.

Finalement, je suis profondément reconnaissante à toute personne qui m'a aidé de près ou de loin, directement ou indirectement durant ce passage.

Dédicace

*Je dédie ce travail à mes chers parents, qu'ils se trouvent
ici le témoignage de ma profonde gratitude pour leur amour,
leur encouragement et leur soutien tout au long de mes études, que ALLAH les bénisse*

*À mes chères sœurs
Et chers frères.*

À tous mes chères amies.

*À tous ceux qui m'aiment.
Je dédie le fruit de mes efforts.*

Table des matières

Introduction générale	1
Chapitre 1 : Introduction à la théorie de la diffusion élastique	4
1.1 Introduction.....	4
1.2 Méthodes de calcul des sections efficaces.....	4
1.2.1 Analyse en ondes partielles – Méthode de déphasage	5
1.2.2 Approximation de Born	7
1.3 Les différents potentiels utilisés dans le calcul des sections efficaces différentielles ...	10
1.3.1 Densité de charge électronique	10
1.3.2 Potentiel optique	11
1.3.2.1 Potentiel statique.....	12
1.3.2.2 Potentiel d'échange.....	13
1.3.2.3 Potentiel de corrélation - polarisation.....	13
1.3.2.3.1 Potentiel de polarisation de Buckingham	13
1.3.2.3.2 Potentiel de corrélation de Padial et Norcross	14
1.4 Mesure d'une collision.....	14
1.4.1 Sections efficaces.....	14
1.4.2 Section efficace différentielle.....	16
1.4.3 Section efficace intégrale	18
1.5 Présentation de la biomolécule cible.....	18
1.5.1 Acide désoxyribonucléique ADN	18
1.5.2 Acide ribonucléique ARN.....	19
1.5.3 Cytosine.....	20
Chapitre 2: Résultats et discussions	21
2.1 Introduction.....	21
2.2 Densité électronique de la biomolécule cytosine.....	21
2.3 L'effet de l'énergie incidente sur sections efficaces différentielles (SED).....	22
2.4 L'effet de l'angle de diffusion sur sections efficaces différentielles (SED).....	27
2.5 Section efficace intégrale de la molécule cytosine.....	29
Conclusion générale	31
Bibliographie	33

Introduction générale

La compréhension du comportement d'une matière (biologique ou non) soumise à une irradiation demeure encore aujourd'hui un souci majeur pour la communauté scientifique, qu'il soit de nature électromagnétique, électronique ou ionique, un rayonnement induit dans la matière des dépôts d'énergie parfois très importants et extrêmement localisés. Pour cela, comprendre les processus de collisions lors de l'exposition de la matière à une irradiation est très important pour plusieurs domaines comme, par exemple, la physique des plasmas [1], l'astrophysique [2], l'industrie alimentaire [3], la radiobiologie [4,5] ou encore la chimie [6]. En effet, lorsqu'on interagit un faisceau incident sur une cible atomique ou moléculaire et en analysant les caractéristiques du faisceau diffusé, on peut obtenir des informations sur les interactions fondamentales, sur la dynamique interne de la cible, sur sa structure, etc. En revanche, les diffusions peuvent être classées en deux catégories ; la diffusion élastique au cours de laquelle l'énergie interne des deux particules reste inchangée, seules les directions de propagation sont modifiées et la diffusion inélastique au cours de laquelle une partie de l'énergie est cédée à la cible qui est dans un état excité durant la collision.

Dans ce qui suit, nous nous intéressons à la diffusion élastique par impact des particules chargées (électrons) de la matière biologique sachant bien qu'aujourd'hui, il est clairement reconnu que la principale entité sensible d'un organisme irradié est l'acide désoxyribonucléique (ADN) qui a le rôle de renfermer l'information génétique [7]. Cependant, de nombreuses expériences [8] ont clairement mis en évidence que l'ADN situé à l'intérieur du noyau cellulaire représentait la cible privilégiée lors d'une irradiation, et que les dommages subis par cette macromolécule (ce qu'on appelle mutation génétique) étaient corrélés au processus de mort cellulaire. De plus, une lésion à notre ADN peut entraîner des troubles médicaux ou encore un cancer. Effectivement, la plupart des procédures pour détruire les cancers délivrent les radiations au patient d'une manière externe à l'aide des accélérateurs comme pour le traitement externe de la prostate. Bien que de tels traitements apportent des avantages substantiels, il est impossible d'empêcher les radiations de détruire ou d'endommager les tissus sains au voisinage des cellules malignes, spécialement quand les radiations doivent traverser des tissus sains pour les atteindre ; mais avec l'apparition de nouvelles techniques, on peut ainsi régler l'énergie et l'orientation du rayonnement pour viser les tissus malades en touchant le moins possible aux

tissus sains. En biologie des rayonnements, l'eau a été largement étudiée par plusieurs groupes [9,10] essentiellement en raison de son abondance dans la matière biologique.

Dans le cadre de ce travail, nous sommes allés plus loin en modélisant le milieu biologique, non pas par la molécule d'eau, mais par une base azotée telle que la cytosine. Notre choix est porté sur cette molécule (cible) pour son abondance dans le corps humain et son agencement à plusieurs autres molécules différentes. De plus, cette molécule cible (la cytosine) est un constituant plus important de l'ADN et de l'ARN sous forme de nucléotides dans la cellule vivante. D'ailleurs, plusieurs travaux théoriques et expérimentaux portant une étude sur les collisions élastiques entre les particules chargées et cette biomolécule ont été reportés. Particulièrement, Mozejko et Sanche [11] ont calculé les sections efficaces différentielles et intégrales de la diffusion élastique des électrons avec les différentes bases d'ADN et d'ARN telles que l'uracile, la cytosine, la guanine et l'adénine en utilisant la méthode des atomes indépendants (MAI) incluant un potentiel statique et de polarisation pour des énergies incidentes allant de 50eV à 4000eV. Les mêmes auteurs ont également calculé les sections efficaces intégrales en utilisant le modèle de collision binaire (BEB) du seuil d'ionisation jusqu'à 5000eV. De plus, Winstead et al. [12] ont signalés des sections efficaces calculées pour la diffusion élastique d'électrons lents par la thymine et la cytosine et par les nucléosides associés, la désoxy-thymidine et désoxy-cytidine. Mentionnons aussi la méthode Schwinger qui a été développée par Winstead et al. [12] afin de calculer dans la gamme des énergies (20eV-5MeV) les sections efficaces différentielles de la diffusion élastique électronique en considérant tous les effets physiques pour l'adénine, la guanine, la thymine et la cytosine. Notamment, Xinglan Luo et ses collaborateurs [13] ont démontré l'importance des électrons à basse énergie dans la gamme (2-20 eV) pour la rupture de brin d'ADN. En 2018 Chernyshova et al. [14] ont calculé la section efficace de diffusion totale pour les faibles énergies incidentes allant de 0 jusqu'à 9 eV pour les molécules de thymine en phase gazeuse. D'autre part plusieurs chercheurs ont étudié les dommages induits par le rayonnement sur les molécules biologiques à l'aide de Geant4 [15,16] à faibles énergies de diffusion, nous avons également trouvé le modèle incluant le potentiel statique, les effets d'échange et de corrélation-polarisation développé par Tozani et Greene [17] sur des bases d'ADN et d'ARN. En supplément, Dora et al. [18] ont développé la méthode de la matrice R pour évaluer les sections efficaces élastiques et inélastiques sur les bases cytosine, thymine et pyrimidine. En outre, Beak et al. [19,20] ont proposé le modèle modifié d'atomes indépendants (MMAI) pour prendre en compte la diffusion multiple d'électrons à l'intérieur de la molécule et la diffusion due aux potentiels à longue distance.

Etant donné le succès du modèle développé par Aouchiche et al. [21] et Champion et al. [22], nous proposons de l'appliquer pour la molécule cytosine. De plus dans ce travail, on va s'intéresser aux énergies des électrons de basses et hautes énergies, puisque ce paramètre énergétique influe beaucoup sur le phénomène de collisions. En effet, plus l'énergie de l'électron est faible, plus la particule incidente passe plus proche de la molécule cible. Ainsi des effets fins telle que la diffusion multiple de l'électron sur la molécule, peuvent avoir une très grande importance dans les interactions. Les résultats de ces interactions sont rapportés sous forme de sections efficaces différentielles et intégrales. Ces deux quantités jouent un rôle important dans la compréhension de processus de diffusion. En effet, la section efficace intégrale contient des informations sur la probabilité de diffusion. Tandis que la section efficace différentielle est nécessaire pour les études quantitatives dans les techniques d'analyse des surfaces, la microscopie électronique et le traitement des rayonnements.

Le plan de ce mémoire est constitué de deux chapitres ; le premier chapitre est réservé à des rappels théoriques portant sur la diffusion élastique (méthode d'ondes partielles et approximation de Born), comme nous y présentons aussi la molécule cytosine avec ses différentes caractéristiques et discutons encore les potentiels statique, d'échange et de corrélation-polarisation utilisés.

Le deuxième chapitre est consacré aux résultats numériques obtenus à savoir, les sections efficaces différentielles pour différentes valeurs d'énergies incidentes en fonction de l'angle de diffusion et celles obtenues en fonction de l'énergie incidente, pour des angles de diffusion différents et cela dans le but de montrer les effets des phénomènes physiques (échange, corrélation-polarisation, interaction inter-atomique, diffusion multiple,...) intervenants dans les processus de collisions.

Enfin, nous terminerons ce travail par une conclusion où les points les plus importants sont consignés.

Chapitre 1

Introduction à la théorie de la diffusion élastique

1.1 Introduction

Dans ce chapitre introductif, on étudie quelques notions élémentaires de la théorie des collisions. En effet lorsqu'un faisceau d'électrons interagit avec une cible atomique ou moléculaire, deux types de collisions peuvent être distingués: élastique ou inélastique. Dans le premier cas, la structure interne de la cible atomique ou moléculaire ne change pas durant la collision. En revanche, dans le processus inélastique, la particule incidente transfère une partie de son énergie cinétique à la cible qui se traduit, soit par excitation électronique, par ionisation et/ou par fragmentation ...etc. Dans notre cas, nous nous intéressons qu'à la diffusion élastique des électrons par une cible biomoléculaire au cours de laquelle l'énergie cinétique totale est conservée. Les résultats de cette expérience s'expriment assez souvent au moyen des quantités physiques appelées sections efficaces de diffusion élastique. Ces dernières sont liées à la probabilité d'interaction qui est décrite par les ondes associées aux particules en interaction. Il faut donc étudier l'évolution de la fonction d'onde associée aux particules incidentes sous l'influence des interactions avec les particules de la cible, en considérant une contribution des trois termes essentiels tels que le potentiel statique, le potentiel d'échange et le potentiel de corrélation –polarisation.

1.2 Méthode de calcul des sections efficaces

Dans le but d'étudier les sections efficaces, on utilise deux méthodes différentes selon l'énergie de la particule incidente. En effet dans le cas d'une énergie incidente élevée, la cible est moins perturbée par le faisceau incident et le calcul de la section efficace dans ce cas se fait dans le cadre de l'approximation de Born. Tandis que pour des faisceaux incidents de basses énergies, cette approximation n'est plus valide, donc les sections efficaces sont calculées par une méthode appelée méthode de déphasage, utilisant un développement en ondes partielles.

1.2.1 Analyse en ondes partielles - Méthode de déphasage

On traite la diffusion d'une particule par un potentiel central avec une onde Ψ d'amplitude de diffusion f et de vecteur d'onde incident k . On développe cette onde en série de polynômes de Legendre [23] :

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l \frac{R_l(r)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (1.1)$$

Dans cette expression, les fonctions harmoniques sphériques sont données par :

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (1.2)$$

Avec $\frac{R_l(r)}{r}$ est la fonction radiale, solution radiale de l'équation de Schrödinger

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - k^2 \right] \frac{R_l(r)}{r} = 0 \quad (1.3)$$

Où $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ est l'énergie incidente, $V(r)$ est le potentiel d'interaction et $\hbar^2 l(l+1)$ est la valeur propre de carré du moment cinétique orbital \vec{L} , avec l est le nombre quantique orbital associé à \vec{L} et m est le nombre quantique magnétique associé à la projection de \vec{L} .

En absence du potentiel $V(r) = 0$ (particule libre), les solutions de l'équation de Schrödinger (1.3) sont des ondes planes avec un vecteur d'onde \vec{k} . Dans ce cas la fonction d'onde $\Psi(\vec{r})$ s'écrit :

$$\Psi_{n,l,m}^0(r, \theta, \varphi) = C j_l(kr) Y_l^m(\theta, \varphi) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (1.4)$$

Avec $j_l(kr)$ est une fonction de Bessel sphérique.

Le projectile possède un vecteur d'onde incident \vec{k} qui est parallèle à l'axe (oz) alors $e^{i\vec{k}\vec{r}} = e^{ikz}$, on fait un développement de l'onde plane en termes d'ondes sphériques (ondes partielles) comme la montre la formule ci-dessous:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) j_l(kr) \quad (1.5)$$

Où $P_l(\cos \theta)$ est le polynôme de Legendre de degré l donné par:

$$P_l(\cos \theta) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_l^0(\theta, \varphi) \quad (1.6)$$

La forme asymptotique de la fonction de Bessel sphérique $j_l(kr)$ pour $r \rightarrow \infty$ est définie par l'expression suivante:

$$j_l(kr)_{r \rightarrow \infty} \sim \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) \quad (1.7)$$

On remplace l'équation (1.7) dans l'équation (1.5) on obtient alors:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) \quad (1.8)$$

En tenant compte de la notation complexe de la fonction sinus, l'équation (1.7) devient:

$$j_l(kr)_{r \rightarrow \infty} \sim \sum_{l=0}^{\infty} -\frac{1}{kr} \frac{\left(e^{-ikr} e^{i\frac{l\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-i\frac{l\pi}{2}}\right)}{2i} \quad (1.9)$$

En injectant l'expression ci-dessus dans l'équation (1.5), on obtient la forme suivante:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{1}{2ikr} \left((-1)^{l+1} e^{-ikr} + e^{ikr}\right) \quad (1.10)$$

Dans le dernier facteur de l'équation (1.10), on remarque que le premier terme représente la composante de l'onde plane se propageant vers l'origine (onde entrante), tandis que l'autre terme se propage vers l'infini (onde sortante), ici l'onde sortante n'est pas l'onde diffusé car on n'a pas encore inclut le potentiel.

Si on envoie une onde plane vers un potentiel, la présence du celui-ci va diffuser l'onde, ce qui aura un effet sur l'onde sortante seulement. Quand $r \rightarrow \infty$, le terme $\frac{l(l+1)}{r^2}$ tend vers zéro et le potentiel $V(r)$ étant à portée finie devient nul aussi, où la fonction radiale $R_l(r)$ de l'équation (1.3) a pour forme asymptotique:

$$\frac{R_l(r)}{r} \sim \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k)\right) \quad (1.11)$$

En injectant l'équation ci-dessus dans l'équation (1.1), on obtient:

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k)\right) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (1.12)$$

Puisque le potentiel $V(r)$ a une symétrie sphérique, la dépendance en φ disparaît ($m=0$), ce qui nous permet d'écrire la fonction d'onde diffusée indépendante de l'angle azimutal φ et en tenant compte de la notation complexe de la fonction sinus, la fonction $\Psi_{n,l,0}(r, \theta)$ est donnée comme suit:

$$\Psi_{n,l,0}(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{1}{2ikr} \left((-1)^{l+1} e^{-ikr} + S_l(k) e^{ikr} \right) \quad (1.13)$$

Où $S_l(k)$ est une phase qui s'écrit:

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)} \quad (1.14)$$

Où $\delta_l(k)$ est le déphasage de l'onde qui dépend de l'énergie incidente.

L'équation (1.13) peut s'écrire aussi sous cette forme:

$$\Psi_{n,l,0}(r, \theta) = e^{ikz} + \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{1}{2ikr} (S_l(k) - 1) e^{ikr} \equiv e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (1.15)$$

Par identification, on trouve l'amplitude de diffusion $f(\theta)$:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) (S_l(k) - 1) \quad (1.16)$$

Nous écrivons le facteur $e^{2i\delta_l}$ donné dans l'équation (1.14) comme suit :

$$e^{2i\delta_l} = 1 + 2ie^{i\delta_l} \sin \delta_l \quad (1.17)$$

En remplaçant les équations (1.6) et (1.14) dans l'équation (1.16), on obtient alors:

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} e^{i\delta_l} \sin \delta_l Y_l^0(\theta) \quad (1.18)$$

On déduit la section efficace de diffusion donnée par le carré de l'amplitude de diffusion :

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \left| \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} e^{i\delta_l} \sin \delta_l Y_l^0(\theta) \right|^2 \quad (1.19)$$

1.2.2 Approximation de Born

La décomposition de la section efficace en termes d'ondes partielles est utile particulièrement à basse énergie. Une autre approximation dite de Born s'applique à haute énergie, si le potentiel est faible. Cette approximation ne fait pas de décomposition angulaire, mais elle s'applique quel que soit les propriétés du potentiel. Il s'agit, en général, d'une application de la théorie des perturbations au problème de diffusion. De plus l'approximation de Born permet d'exprimer l'amplitude de diffusion en termes de potentiel d'interaction $V(r)$

entre le faisceau incident et la cible où les particules incidentes et diffusées sont représentées par des fonctions d'ondes planes.

Pour le calcul des états quantiques d'un projectile de masse m et d'énergie potentielle $V(r)$ on doit résoudre l'équation de Schrödinger suivante :

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (1.20)$$

Où $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$; E est l'énergie d'un projectile qui est la même avant et après la collision puisque celle-ci est réputée élastique.

L'équation (1.20) s'écrit aussi comme suit :

$$(\nabla^2 + k^2)\Psi(\vec{r}) = \frac{2mV(\vec{r})}{\hbar^2}\Psi(\vec{r}) \quad (1.21)$$

Où $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ est relié à l'énergie incidente.

La solution de l'équation (1.21) peut être écrite sous la forme suivante :

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi_h(\vec{r}) + \int d^3r' G(\vec{r} - \vec{r}') \frac{2mV(\vec{r}')}{\hbar^2} \Psi(\vec{r}') \quad (1.22)$$

Où $\Psi_h(\vec{r})$ est une solution de l'équation homogène $[(\nabla^2 + k^2) = 0]$ et $G(\vec{r} - \vec{r}')$ la fonction de Green telle que :

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (1.23)$$

On va choisir comme solution de l'équation homogène une onde plane donc l'équation (1.22) devient comme suit :

$$\Psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int d^3r' G(\vec{r} - \vec{r}') \frac{2mV(\vec{r}')}{\hbar^2} \Psi(\vec{r}') \quad (1.24)$$

L'approximation de Born est une solution formelle itérative de l'équation (1.24). Admettons que l'effet du potentiel est petit, on peut espérer que le deuxième terme dans l'équation (1.24) sera plus petit que le premier.

Donc on peut approximer $\Psi(\vec{r}') = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'}$ et en remplaçant la fonction de Green avec son expression donnée en (1.23) dans l'équation (1.24) on obtient alors :

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int d^3r' G(\vec{r} - \vec{r}') \frac{2mV(\vec{r}')}{\hbar^2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'} \\ &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} V(\vec{r}') e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'} \end{aligned} \quad (1.25)$$

On s'intéresse à la fonction d'onde dans la région asymptotique: $r \rightarrow \infty$. Dans ce cas, on peut approximer $|\vec{r} - \vec{r}'| \sim r$ dans le dénominateur de l'équation (1.25). Par contre dans la phase $e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}$, cette même approximation aurait comme conséquence la perte d'un facteur de phase indépendant de r dans la limite $r \rightarrow \infty$. Donc on fait une approximation de Taylor de $|\vec{r} - \vec{r}'|$ qui donne $|\vec{r} - \vec{r}'| \sim r - \vec{u} \cdot \vec{r}'$. Ainsi, on obtient :

$$\Psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' e^{ik(r-\vec{u} \cdot \vec{r}')} \frac{1}{r} V(\vec{r}') e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r} f(\theta, \varphi) \quad (1.26)$$

Où $f(\theta, \varphi)$ est l'amplitude de diffusion dans l'approximation de Born. Définissant un vecteur $\vec{k}_d = k \cdot \vec{u}$ (c'est le vecteur d'onde des particules diffusées en direction r), on déduit $f(\theta, \varphi)$:

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' e^{-i(\vec{k}_d - \vec{k}) \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \quad (1.27)$$

Ce terme $f_B(\theta, \varphi)$ est appelé première approximation de Born; il décrit le passage de la particule incidente de son état initial $\Psi_i(\vec{k}, \vec{r})$ de moment \vec{k} vers un état final $\Psi_f(\vec{k}_d, \vec{r})$ de moment \vec{k}_d . Dans ce cas, on ne tient compte que d'une seule interaction de la particule incidente avec la cible moléculaire. De plus il est calculable dès que l'on connaît la forme analytique du potentiel et qui est essentiellement l'élément de matrice du potentiel entre les ondes incidentes et diffusées. À un facteur près, c'est la transformée de Fourier du potentiel pour le vecteur d'onde $\vec{k}_d - \vec{k}$ qui n'est autre que le transfert de moment lors de la collision.

L'équation (1.27) s'écrit aussi comme suit :

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' e^{-i \cdot \vec{q} \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \quad (1.28)$$

Où $\vec{q} = \vec{k}_d - \vec{k}$ qui est le moment de transfère lors de la collision.

L'expression de l'amplitude de diffusion se simplifie pour un potentiel central, puisque il est possible d'effectuer les intégrations sur les angles θ, φ . Donc l'expression précédente s'écrit:

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty V(r') r'^2 dr' \int_0^\pi e^{-i \cdot \vec{q} \cdot \vec{r}'} \sin\theta' d\theta' \int_0^{2\pi} d\varphi \quad (1.29)$$

Sachant que les deux vecteurs d'ondes \vec{k}_d et \vec{k} ont le même module, mais n'ont pas la même direction et font entre eux un angle, on a le moment de transfère $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$ d'où l'amplitude de Born indépendante de φ s'écrit :

$$f(\theta) = -\frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{2k \sin \frac{\theta}{2}} \int_0^\infty r' V(r') \sin(2k \sin \frac{\theta}{2} r') dr' \quad (1.30)$$

On déduit la section efficace de diffusion qui est donnée par le carré de l'amplitude de diffusion :

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \left| -\frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{2k \sin \frac{\theta}{2}} \int_0^\infty r' V(r') \sin(2k \sin \frac{\theta}{2} r') dr' \right|^2 \quad (1.31)$$

Nous savons maintenant calculer la section efficace de diffusion par deux méthodes: la première s'applique à basse énergie (méthode de déphasage) et la deuxième à haute énergie (approximation de Born). Notons que pour effectuer les calculs, nous devons connaître le potentiel d'interaction.

1.3 Les différents potentiels utilisés dans le calcul des sections efficaces différentielles

Après avoir déterminé les deux méthodes utilisées pour le calcul des sections efficaces de diffusion élastique par impact des particules chargées, on va décrire brièvement les différents potentiels qui y interviennent. Pour cela, on définira d'abord la densité de charge électronique vu que certains potentiels dépendent de celle-ci.

1.3.1 La Densité de charge électronique

À partir des fonctions d'ondes atomiques de Slater, on calcule la densité de charge électronique pour chaque atome de la molécule par la méthode LCAO. La fonction d'onde atomique associée pour chaque atome est donnée par :

$$\Psi_j(r) = \sum_{k=1}^{N_j} a_{jk} \Phi_{n_{jk} l_{jk} m_{jk}}^{\xi_{jk}}(r) \quad (1.32)$$

Où $\Psi_j(r)$ est la fonction d'onde moléculaire associée à l'orbitale j , $\Phi_{n_{jk} l_{jk} m_{jk}}^{\xi_{jk}}(r)$ la fonction d'onde atomique de type Slater introduite dans le développement de chaque orbitale moléculaire et a_{jk} le poids statistique correspondant. Les différents nombres quantiques n_{jk} , l_{jk} , m_{jk} ainsi N_j est le nombre de fonction de Slater utilisée pour construire l'orbitale moléculaire.

La fonction $\Phi_{n_{jk} l_{jk} m_{jk}}^{\xi_{jk}}(r)$ de l'expression (1.32) est écrite comme suit :

$$\Phi_{n_{jk} l_{jk} m_{jk}}^{\xi_{jk}}(r) = R_{n_{jk}}^{\xi_{jk}}(\vec{r}) S_{l_{jk} m_{jk}}(\hat{r}) \quad (1.33)$$

Où \hat{r} est l'angle solide de vecteur position \vec{r} et la partie radiale $R_{n_{jk}}^{\xi_{jk}}(r)$ est exprimée par des fonctions Slater [24] à savoir,

$$R_{n_{jk}}^{\xi_{jk}}(r) = \frac{(2\xi_{jk})^{n_{jk} + \frac{1}{2}}}{\sqrt{2n_{jk}!}} r^{n_{jk}-1} e^{-\xi_{jk}r} \quad (1.34)$$

Et la partie angulaire $S_{l_{jk}, m_{jk}}(\hat{r})$ est exprimée au moyen d'harmoniques sphériques dans leur forme réelle et lié aux harmonique sphériques complexes par :

$$\begin{cases} S_{l_{jk}, m_{jk}}(\hat{r}) = \left[\frac{m_{jk}}{2|m_{jk}|} \right]^{\frac{1}{2}} \left\{ Y_{l_{jk}' - |m_{jk}|}(\hat{r}) + (-1)^{m_{jk}} \left[\frac{m_{jk}}{|m_{jk}|} \right] Y_{l_{jk}' |m_{jk}|}(\hat{r}) \right\} & \text{si } m_{jk} \neq 0 \\ S_{l_{jk}, 0}(\hat{r}) = Y_{l_{jk}, 0}(\hat{r}) & \text{si } m_{jk} = 0 \end{cases} \quad (1.35)$$

Sachant que les harmoniques sphériques $Y_{l_{jk}, m_{jk}}(\hat{r})$ sont normalisés et que la densité de probabilité de présence d'un électron autour du noyau d'un atome dépend du carré du module de la fonction d'onde atomique, alors la distribution totale de la densité de charge d'un atome j de la molécule est donnée par :

$$\rho_j(r) = \sum_{k=1}^{N_j} |R_{n_{jk}}(r)|^2 \quad (1.36)$$

D'où la densité de charge $\rho(r)$ de la molécule est donnée comme suit :

$$\rho(r) = \sum_{j=1}^N \rho_j(r) \quad (1.37)$$

Où N est le nombre d'atome contenus dans la molécule.

1.3.2 Potentiel optique

Ce modèle de potentiel est essentiel pour étudier les interactions qui existent entre les particules chargées et les cibles moléculaires. En effet, le potentiel optique est complexe et permet de traiter la diffusion des électrons par des cibles sphériques [25] donné par cette expression suivante [26] :

$$V_{opt}(r) = V_R(r) + i V_{abs}(r) \quad (1.38)$$

Où les parties réelle et imaginaire du potentiel représentent la diffusion élastique et inélastique respectivement.

La partie réelle $V_R(r)$ se compose de potentiel statique $V_{st}(r)$, le potentiel d'échange $V_e(r)$ et le potentiel de corrélation-polarisation $V_{cp}(r)$:

$$V_R(r) = V_{st}(r) + V_e(r) + V_{cp}(r) \quad (1.39)$$

Les deux termes de l'équation (1.39); le potentiel statique $V_{st}(r)$ et le potentiel d'échange $V_e(r)$ dépendent de la densité de charge électronique de la molécule cible tandis que le potentiel de polarisation $V_p(r)$ dépend exclusivement du moment dipolaire électrique de la molécule. Quant à la partie imaginaire $V_{abs}(r)$ du potentiel optique est décrite par la dissipation de l'énergie de la particule incidente lors d'une collision inélastique telle que l'ionisation et l'excitation.

1.3.2.1 Potentiel statique

Le potentiel statique décrit les différentes interactions coulombiennes entre les différentes charges de la cible avec celle de l'électron incident. Ce potentiel est la somme de deux contributions: l'interaction du projectile avec les noyaux et celle avec les électrons. L'expression de ce potentiel est donnée par [27]

$$V_{st}(r) = \sum_{j=1}^N \left([V_j(r)]_{elec} + [V_j(r)]_{ion} \right) \quad (1.40)$$

Avec N est le nombre d'atomes de la molécule cible et $[V_j(r)]_{elec}$ est la contribution électronique qui peut s'écrire sous la forme suivante:

$$[V_j(r)]_{elec} = \sum_{i=1}^{Norb} Z_i \sum_{k,k=1}^{Nj} a_{jk} a_{jk} \delta(m_{jk} - m_{jk}) \delta(l_{jk} - l_{jk}) \int_0^\infty R_{n_{jk}l_{jk}}^{\zeta_{jk}}(r) \frac{r^2}{r^>} R_{n_{jk}l_{jk}}^{\zeta_{jk}}(r) dr \quad (1.41)$$

Tel que $Norb$ est le nombre d'orbitales atomiques, Z_i est la charge pour chaque atome de la molécule cible, quand au symbole $r^>$ est donné par $r^> = \max(r, r')$ et $R_{n_{jk}l_{jk}}^{\zeta_{jk}}(r')$, la partie radiale de la fonction d'onde de type Slater.

Alors que la contribution ionique $[V_j(r)]_{ion}$ est donnée par cette expression :

$$[V_j(r)]_{ion} = \frac{-Z_j}{r_j} \quad (1.42)$$

Où r_j est la distance entre le projectile et les noyaux des atomes constituant la molécule cible.

1.3.2.2 Potentiel d'échange

Lors d'une interaction, l'électron incident peut arracher un électron à la cible en lui communiquant toute son énergie. De plus, il est probable que l'électron incident peut prendre la place de celui éjecté. Pour décrire ce phénomène, on introduit un potentiel, dit d'échange qui dépend clairement de l'énergie de l'électron incident E_i et la densité de charge électronique. Ce type de potentiel est donné par Hara [28] comme suit:

$$V_e(r) = -\frac{2}{\pi} k_F(r) \left[\frac{1}{2} + \frac{1 - \xi^2}{4\xi} \ln \left| \frac{1 + \xi}{1 - \xi} \right| \right] \quad (1.43)$$

Le vecteur de Fermi k_F est donné par : $k_F(r) = (3\pi^2 \rho(r))^{1/3}$ et $\xi = \frac{k^2 + 2I + k_F^2}{k_F}$ où k représente le vecteur d'onde de l'électron projectile et I est le potentiel d'ionisation de la molécule cible.

1.3.2.3 Potentiel de corrélation-polarisation

Le potentiel de corrélation-polarisation $V_{cp}(r)$ se divise en deux domaines. D'après les articles de WY Baek et al. [29] et N. Sanna et al. [30], il est défini en tant que $V_{corr}(r)$, potentiel symbolisant les interférences entre le nuage électronique de la molécule et le projectile, et $V_{pol}(r)$ est dû aux électrons qui créent un moment dipolaire dans le nuage électronique de la cible moléculaire. Ce dernier est donc plus important pour les basses énergies (électrons moins rapides). Ainsi on définit r_c par le rayon pour lequel les deux potentiels se coupent pour la première fois. Et on a $V_{cp}(r) = V_{corr}$ pour $r < r_c$ et $V_{cp}(r) = V_{pol}(r)$ pour $r > r_c$. L'interaction avec les atomes voisins étant plus forte pour un faible rayon. En effet, on distingue différents types de potentiel de corrélation-polarisation et ceux utilisés dans notre travail sont cités ci-dessous.

1.3.2.3.1 Potentiel de polarisation de Buckingham

Le potentiel de polarisation $V_p(r)$ se réfère au type bien connu de Buckingham donné par :

$$V_{p,B}(r) = -\frac{\alpha_d}{2(r^2 + d^2)^2} \quad (1.44)$$

Où α_d est la polarisabilité moyenne électrique de la molécule et d est le paramètre de coupure qui a été initialement introduit pour éviter la divergence du potentiel au point de départ $r = 0$ et son expression est donnée par Mittleman et Watson [31]:

$$d^4 = \frac{1}{2} \alpha_d Z^{-\frac{1}{3}} b_{pol}^2 \quad (1.45)$$

Où b_{pol} est considéré comme un paramètre ajustable qui dépend de l'énergie incidente, introduit premièrement par Salvat et al. [32] comme suit :

$$b_{pol} = \left\{ \max \left[\frac{(E_i - 50eV)}{16eV}; 1 \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (1.46)$$

Ce dernier terme est développé par Aouchiche et al. [33] sous cette forme :

$$b_{pol} = \left\{ \max \left[\frac{(E_i - 0,5eV)}{0.01eV}; 1 \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (1.47)$$

1.3.2.3.2 Potentiel de corrélation de Padial et Norcross

Pour décrire les effets de corrélation, Padial et Norcross [34] ont défini ce type du potentiel en trois régions selon les valeurs du paramètre de densité r_s :

$$\begin{cases} V_{cor}(r_s) = 0.0311 \log(r_s) + 0.006r_s \log(r_s) - 0.015r_s - 0.058 & r_s \leq 0.7 \\ V_{cor}(r_s) = -0.07356 + 0.02224 \log(r_s) & 0.7 \leq r_s \leq 10 \\ V_{cor}(r_s) = \frac{-0.584}{r_s} + 1.988(r_s)^{-3/2} - 2.450r_s^{-2} - 0.733r_s^{-5/2} & r_s \geq 10 \end{cases} \quad (1.48)$$

Où r_s est le paramètre de densité qui est considéré comme étant le rayon de la sphère contenant un électron. Ce paramètre est défini par cette expression :

$$r_s = (3/4\pi\rho(r))^{-\frac{1}{3}} \quad (1.49)$$

1.4 Mesure d'une collision

Plusieurs caractéristiques physiques peuvent être utilisées pour quantifier une collision. Parmi elles, nous citons les plus utilisées et celles qui reviendront souvent dans plusieurs thèmes de recherche, à savoir les sections efficaces (élastique, inélastique) et le pouvoir d'arrêt (inélastique)...

1.4.1 Sections efficaces

Le terme section efficace est l'un des concepts qui revient le plus souvent dès que nous traitons des collisions élastiques ou inélastiques. La grandeur de section efficace caractérise toute

collision liée à la probabilité d'interaction entre particules pour une réaction donnée, conduisant à un processus élastique ou inélastique. Elle est définie comme étant le rapport du nombre d'interaction par unité de temps (taux d'interaction) sur le flux de particules incidentes, et en générale exprimée par une unité de surface.

On considère un faisceau d'électrons arrivant le long de l'axe oz avec un vecteur d'onde \vec{k}_i et une énergie incidente E_i comme le montre la figure (1.1). On dispose, loin de la région où règne le potentiel et dans la direction repérée par les angles polaires θ et ϕ , un détecteur (ou compteur) dont l'ouverture est vue de O sous l'angle solide $d\Omega$ et ; on compte ainsi le nombre de particules diffusées dN par unité de temps dans l'angle solide $d\Omega$ autour de la direction (θ, ϕ) . Ainsi le nombre dN est proportionnel à $d\Omega$ et au flux Φ_i qui est défini par le nombre de particules incidentes par unité de surface et par unité du temps à travers la relation suivante :

$$dN = \sigma(\theta, \phi) \Phi_i d\Omega \quad (1.50)$$

Cette relation de proportionnalité s'exprime par l'intermédiaire d'un coefficient de proportionnalité, noté $\sigma(\theta, \phi)$ ou appelé encore la section efficace différentielle de diffusion.

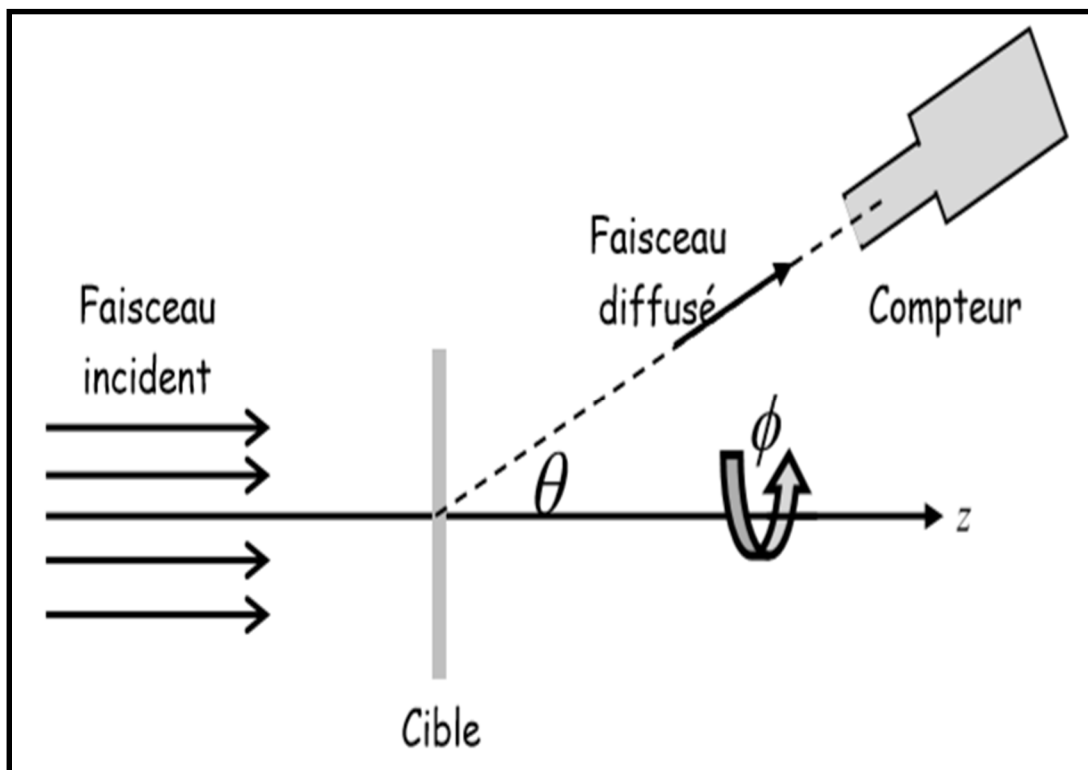


Figure 1.1 – schéma d'une expérience de diffusion

1.4.2 Section efficace différentielle

Presque tout ce que nous savons sur la physique atomique et la physique nucléaire a été découvert par des expériences de diffusion. En effet, les collisions entre des particules et autres sont caractérisées par la section efficace différentielle définie comme étant le rapport du nombre des particules dispersées dans la direction (θ, φ) par unité du temps et par unité d'angle solide, divisé par le flux incident et le calcul numérique de ces sections efficaces différentielles nous permet de remonter aux différentes interactions qui ont eu lieu entre le faisceau incident et la cible moléculaire.

Dans le travail qui suit nous adaptons le modèle de l'atome indépendant pour calculer nos sections efficaces différentielles en s'appuyant sur les articles de W.Y. Baek et al. [19] et S. Hayashi et al. [35]. En première approximation, la section efficace différentielle moléculaire se calcule par sommation des sections efficaces différentielles atomiques dues au potentiel à courte portée.

$$I_S = \sum_{i=1}^N |f_i|^2 \quad (1.51)$$

Ces dernières sont calculées comme étant le module carré de l'amplitude de diffusion définie par cette expression :

$$f_i(\theta) = (2ik)^{-1} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [\exp(2i\delta_l^i) - 1] P_l(\cos \theta) \quad (1.52)$$

Tel que: l est le nombre quantique, δ_l^i est le déphasage obtenu en résolvant l'équation de Schrödinger indépendante du temps (méthode de déphasage), θ est l'angle de diffusion et P_l est le polynôme de Legendre.

En faisant intervenir le potentiel de corrélation polarisation V_{cp} et le potentiel d'échange V_e dans l'équation (1.20), on obtient f_L . Le module au carré de f_L nous donne un second terme.

La prise en compte de l'interférence entre les deux potentiels à courte portée et à longue portée donne le terme I_{LS} qui s'écrit sous la forme suivante:

$$I_{LS} = 2|f_L| \sum_{i=1}^N |f_i| \cos(\eta_L - \eta_i) \sin qR_i/qR_i \quad (1.53)$$

Les paramètres η_L et η_i représentent respectivement les phases des amplitudes de diffusion f_L et f_i . η est généralement défini par cette expression :

$$f = |f|e^{i\eta} \quad (1.54)$$

Quant à R_i est la position de l'atome dans le centre de masse de la molécule et q est le moment du transfert ($q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$; k est le nombre d'onde des électrons incidents).

En tenant compte des interactions entre les atomes au sein de la molécule cible, on obtient alors le terme I_{SS} :

$$I_{SS} = \sum_{i \neq j}^N f_i^* f_j \sin(qR_{ij}) / qR_{ij} \quad (1.55)$$

Tel que :

f_i et f_j sont respectivement les amplitudes de diffusions des atomes i et j , ainsi R_{ij} est la distance interatomique.

L'effet de la diffusion multiple doit être incorporé puisqu'une telle cible a plusieurs centres diffuseurs (molécule à plusieurs atomes), l'interférence entre la simple et la double diffusion donne le terme $I_{SD}^{(1)}$ qui s'écrit comme suit :

$$I_{SD}^{(1)} = \frac{i}{k} \sum_{i \neq j}^N (f_i + f_j)^* \sum_{l_1 l_2 l_3} (2l_1 + 1)(2l_2 + 1)(2l_3 + 1) \times \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 P_{l_2}(\cos \theta) j_{l_3}^2(kR_{ij}) A_{l_1}(k, j) A_{l_2}(k, i) \quad (1.56)$$

Le deuxième terme de la multiple diffusion qui décrit l'interférence entre la double diffusion est donnée par l'expression suivante :

$$I_{DD}^{(0)} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{i \neq j}^N \sum_{l_3} (2l_3 + 1) j_{l_3}^3(kR_{ij}) \times \sum_{m_3} \left| \sum_{l_1, l_2} (2l_1 + 1)(2l_2 + 1)^2 Y_{l_2}^{-m_3}(\theta, 0) A_{l_1}(k, j) A_{l_2}(k, j) \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & -m_3 & m_3 \end{pmatrix} \right|^2 \quad (1.57)$$

Quant à, $j_n(x)$ est la fonction sphérique de Bessel d'ordre n et $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ est l'harmonique sphérique.

$\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ est le symbole 3j de Wigner et la quantité $A_l(k, i)$ est définie comme :

$$A_l(k, i) = \exp(i\delta_l^{(i)}) \sin \delta_l^{(i)} \quad (1.58)$$

Finalement la section efficace différentielle est la somme de tous les termes cités ci-dessus et se résume par l'équation suivante :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = I_S + |f_L|^2 + I_{LS} + I_{SS} + I_{SD}^{(1)} + I_{DD}^{(0)} \quad (1.59)$$

1.4.3 Section efficace intégrale

Elle est obtenue en intégrant les sections efficaces différentielles sur tout l'angle solide Ω , la section efficace intégrale est définie par :

$$\sigma(E) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \frac{d\sigma(E, \theta)}{d\theta} \sin \theta d\theta \quad (1.60)$$

1.5 Présentation de la biomolécule cible

L'importance des expériences de diffusion de particules pour l'étude de la matière biologique est universellement connue. C'est en faisant interagir un projectile (faisceau incident) sur une cible atomique ou moléculaire et en analysant les caractéristiques du faisceau diffusé que l'on peut obtenir des informations sur les interactions fondamentales, la dynamique interne de la cible et sa structure, etc. C'est pour cela que la compréhension de la diffusion est très importante pour plusieurs domaines tel que le domaine biomédical, où la diffusion des particules par une cible biomoléculaire est très efficace pour la destruction des cellules cancéreuses, sachant bien que ce sont principalement les modifications subies par l'ADN nucléaire qui expliquent les effets des rayonnements incidents sur la tumeur afin de neutraliser le maximum de cellules cancéreuses sans détruire les cellules saines voisines.

1.5.1 Acide désoxyribonucléique ADN

L'ADN est un acide nucléique qui se trouve dans le noyau de nos cellules, il est décrit comme étant une macromolécule composée d'un enchainement d'unités structurales appelées nucléotides, ces derniers sont constitués d'une base qui peut être une purine ou une pyrimidine,

d'un pentose (ose à cinq atomes de carbone) et d'un groupement phosphate (ou acide phosphorique). Dans l'ADN, les bases puriques sont l'adénine et la guanine et les bases pyrimidiques sont la cytosine et la thymine. La structure double hélice de l'ADN de diamètre de 20 Å nous montre bien que cet acide nucléique est constitué de deux brins dirigés de manière antiparallèle et associés par des liaisons hydrogène entre les bases et que ces liaisons s'établissent toujours entre une purine de l'un des brins et une pyrimidine de l'autre brin ; dans cet appariement complémentaire, l'adénine est toujours associée à la thymine par deux liaisons hydrogène et la guanine interagit avec la cytosine grâce à trois liaisons hydrogène. L'acide désoxyribonucléique est défini comme un responsable de l'information génétique ou encore le support de l'hérédité chez les êtres vivants. Cette information est transmise aux nouvelles cellules par l'intermédiaire des particules d'ADN présentes à l'intérieur des chromosomes dans toutes nos cellules appelées gènes. Quand il y a une modification dans notre ADN, un gène peut subir une mutation génétique par conséquent les instructions qu'il donne à la cellule peuvent empêcher celle-ci d'agir correctement, donc la cellule croît et se divise de façon désordonnée et cela pourrait engendrer un cancer. Dans nos cellules, il existe aussi des morceaux d'ADN codant pour des ARN.

1.5.2 Acide ribonucléique ARN

L'ARN est un acide nucléique présent chez pratiquement tous les êtres vivants dans le noyau et le cytoplasme, cet acide est en général synthétisé dans les cellules à partir d'une matrice d'ADN dont il est une copie (transcription) à l'aide des enzymes appelés ARN polymérase, sa structure chimique est alors proche de celle de l'ADN. Les cellules utilisent l'acide ribonucléique comme support intermédiaire des gènes pour synthétiser des protéines dont elles ont besoin, comme il intervient aussi dans des réactions chimiques du métabolisme cellulaire. En effet l'ADN mitochondrial code pour 13 protéines qui servent toutes à la synthèse de l'ATP (adénosine triphosphate) qui est une molécule énergétique.

On trouve quatre bases nucléiques dans l'ARN : l'adénine, la guanine, la cytosine et l'uracile. En fait l'ARN a de nombreuses similitudes avec l'ADN, avec cependant quelques différences importantes ; d'un point de vue structurel, l'ARN contient des résidus de ribose là où l'ADN contient du désoxyribose, ce qui rend l'ARN chimiquement moins stable, tandis que la thymine de l'ADN y est remplacée par l'uracile, qui possède les mêmes propriétés d'appariement de base avec l'adénine. Sur le plan fonctionnel, l'ARN se trouve le plus souvent dans les cellules sous forme monocaténaire, c'est-à-dire de simple brin, tandis que l'ADN est

présent sous forme de deux brins complémentaires formant une double-hélice. Enfin, les molécules d'ARN présentes dans les cellules sont plus courtes que l'ADN du génome, leur taille variant de quelques dizaines à quelques milliers de nucléotides, contre quelques millions à quelques milliards de nucléotides pour l'acide désoxyribonucléique. Dans le travail qui suit, on va s'intéresser à l'étude de la cytosine pour décrire le phénomène de la diffusion élastique.

1.5.3 Cytosine

La cytosine est une base azotée de la famille des pyrimidines, de formule brute $C_4H_5N_3O$ (figure 1.2) ; c'est une molécule hétérocyclique puisque les cycles ne sont pas composés uniquement de carbone. Elle participe à la formation de la cytidine (où la cytosine est associée à un ribose) qui entre notamment dans la composition des acides nucléiques (ADN et ARN). Dans les acides nucléiques, la cytosine s'apparie avec la guanine grâce à trois liaisons hydrogènes et elle est la seule base pouvant être méthylée dans l'ADN, une modification épi génétique qui a pour effet de modifier l'expression des gènes. Sa masse molaire est de l'ordre 111.1 g/mol et du nombre d'électrons qui vaut 58 et 29 orbitales moléculaires [34], de plus elle se caractérise par le moment dipolaire 7.0699 D. Pour la distribution des charges ; les atomes d'azote, d'oxygène et de carbone en para par rapport au groupement carbonyle ont des charges négatives et tous les autres atomes ont des charges positives.

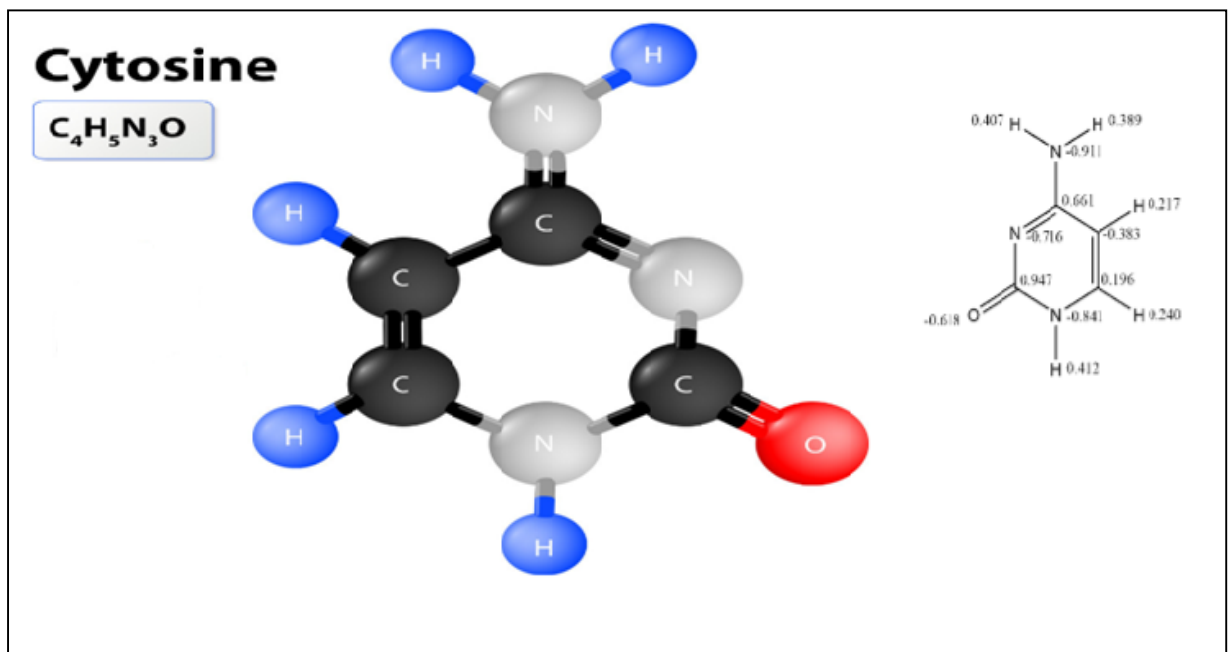


Figure 1.2 – la structure chimique de la cytosine

Chapitre 2

Résultats et discussions

2.1 Introduction

Dans ce second chapitre, nous présentons l'ensemble des résultats obtenus dans le cadre de ce travail portant sur le calcul des sections efficaces différentielles et intégrales de diffusion élastique de la molécule cytosine qui est l'une des bases d'ADN et d'ARN par impact d'électrons. Le but étant, d'une part de comprendre l'effet des interactions entre la particule incidente et la cible moléculaire (à courte et longue distance) sur les sections efficaces différentielles et la manière de leurs évolutions en fonction de l'angle de diffusion et de l'énergie de rayon incident à travers cette biomolécule.

2.2 Densité électronique de la biomolécule cytosine

La figure ci-dessous nous montre clairement la façon dont la densité de charge électronique est distribuée dans la molécule cytosine ($C_4H_5N_3O$) en fonction de la distance radiale.

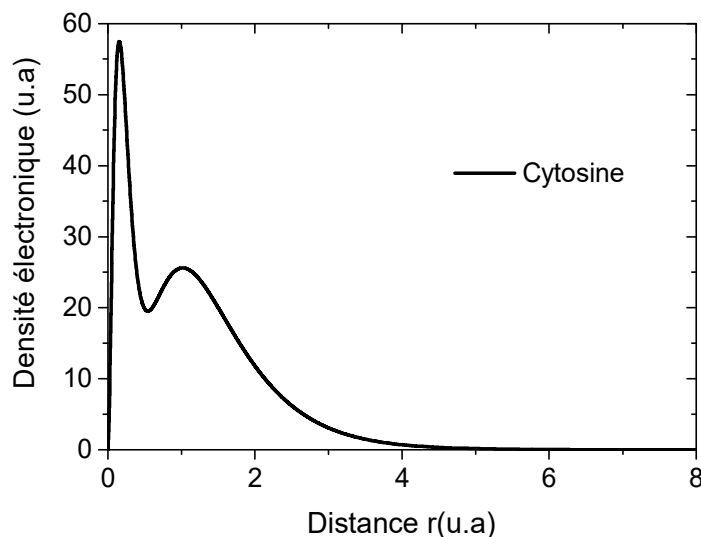


Figure 2.1 – Densité de charge électronique $\rho(r)$ en fonction de la distance radiale r

A partir de la figure 2.1, pour la distance $r = 0,16u.a.$, on observe que la distribution des électrons sur la molécule cytosine est maximale, puis commence à diminuer jusqu'à atteindre

un minimum pour $r = 0.55u.a$, ensuite remonter à nouveau pour exhiber un maximum à une distance $r = 1.02u.a$. Cette densité est significative pour des valeurs de $r \leq 5u.a$ et au-delà de cette distance, elle devient quasiment nulle. On déduit que l'interaction électron-cytosine se limite à une distance r inférieure à $5u.a$.

2.3 L'effet de l'énergie incidente sur sections efficaces différentielles (SED)

Les calculs des sections efficaces différentielles de diffusion élastique obtenus par impact d'électrons sur la molécule cytosine ($C_4H_5N_3O$) en fonction de l'angle de diffusion sont effectués selon une méthode qui est bien définie dans la partie (1.4.2) pour différentes énergies incidentes E_i : 50eV, 60eV, 70eV, 90eV, 100eV, 200eV, 400eV, 500eV, 600eV, 800eV, 900eV et 1000eV. Le choix de ces valeurs revient aux résultats disponibles dans la littérature pour tester notre méthode de calcul. Avec la contribution de différents types de potentiels vue dans le premier chapitre, on a réussi à atteindre des résultats qui sont représentés sur les figures (2.2, 2.3 et 2.4). Sachant que le terme principale I_S qui représente la section efficace due à la contribution du potentiel statique (courte portée) est représenté en trait noir sur les figures suivantes, le terme $I_S + I_{SS}$ en trait rouge, le terme $I_S + I_{SS} + |F_L|^2 + I_{LS}$ décrivant la section efficace différentielle sans la diffusion multiple est en trait bleu et finalement la section efficace engendrant tous les phénomènes physiques est en trait magenta (voir équ. 1.59).

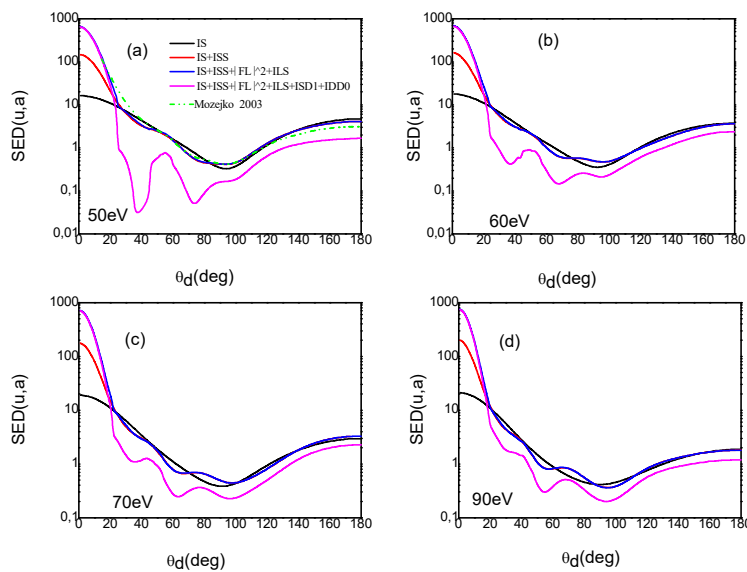


Figure 2.2 – Variation de la section efficace différentielle de la molécule cytosine en fonction de l'angle de diffusion θ_d pour différentes énergies incidentes : 50eV, 60eV, 70eV et 90eV

Pour une énergie incidente $E_i = 50eV$ (figure 2.2.a), on remarque que lorsqu'on introduit uniquement le terme de la contribution du potentiel statique I_S (la courbe noir de la figure 2.2.a), l'amplitude de diffusion augmente légèrement à faibles angles de diffusion ($\theta_d \leq 10^\circ$) et puis diminue jusqu'à atteindre un minimum aux environs de $\theta_d = 90^\circ$, ensuite ce terme I_S augmente à nouveau au-delà de cet angle de diffusion. En supplément, lorsqu'on rajoute le terme I_{SS} (la courbe rouge de la figure. 2.2.a) représentant la section efficace due à la contribution inter-atomique, nous remarquons que son amplitude est importante à faibles angles de diffusion, comme nous observons aussi pour des angles de diffusion $\theta_d = 27^\circ, \theta_d = 50^\circ, \theta_d = 82^\circ$ et dans la gamme angulaire compris entre $\theta_d = 114^\circ$ et $\theta_d = 119^\circ$ que l'effet de l'interaction inter-atomique est négligeable. En prenant en considération les deux termes $|F_L|^2$ et I_{LS} (la courbe bleu de la figure. 2.2.a) qui représentent les sections efficaces dues respectivement à la contribution du potentiel à longue portée et aux interférences entre le potentiel statique et les potentiels d'échange, corrélation et polarisation, nous constatons que leur amplitude a légèrement augmenté pour des angles de diffusion inférieurs à $\theta_d = 24^\circ$, au-delà de cet angle, ces deux contributions sont négligeables. En revanche, l'ajout des deux termes de diffusion multiple ISD^1 et IDD^0 nous montre clairement une diminution de l'amplitude sur toute la gamme d'angle de diffusion (voir la courbe magenta de la figure. 2.2.a) avec l'apparition de deux minimums plus profonds pour $\theta_d = 38^\circ$ et $\theta_d = 73^\circ$. Finalement, nous constatons qu'il y'a un bon accord lors de la comparaison des résultats obtenus pour les sections efficaces différentielles de la diffusion élastique d'électrons par la cible cytosine pour une énergie de $50eV$, avec les mesures théoriques de Mozejko et al. [36].

Pour une énergie incidente $E_i = 60eV$ (figure 2.2.b), nous remarquons pour le terme I_S (la courbe noir de la figure. 2.2.b) que son amplitude de diffusion est importante à faibles angles de diffusion $\theta_d \leq 10^\circ$ puis commence à diminuer en fait et à mesure que l'angle de diffusion augmente jusqu'à atteindre un minimum aux alentours de $\theta_d = 90$, ensuite augmente à nouveau. Par contre, nous observons presque les mêmes évolutions pour les autres termes des sections efficaces différentielles, sauf que la contribution de I_{SS} (la courbe rouge de la figure 2.2.b) fait apparaître un peu plus d'oscillation qui en effet caractérisent les interférences dues aux liaisons inter-atomiques de la molécule cible. On constate aussi, que la contribution de $|F_L|^2$ et I_{LS} est négligeable devant celle de I_{SS} pour des angles de diffusion allant de $\theta_d =$

23° à $\theta_d = 180^\circ$. De plus, la courbe magenta de la figure (2.2.b) suit le même comportement que celui observé précédemment pour une énergie de 50eV (figure 2.2.a), avec réduction importante de deux profondeurs des minimas qui se localisent à $\theta_d = 35.57^\circ$ et $\theta_d = 66^\circ$. Concernant la section efficace globale, on remarque que l'amplitude de ce terme a aussi diminué à cause de l'influence imposée par la multiple diffusion.

La figure (2.2.c) montre que le terme statique I_S (courbe noir) a une amplitude importante pour les faibles angles de diffusion ($\theta_d \leq 10^\circ$), ensuite diminue jusqu'à atteindre un minimum aux environs de $\theta_d = 90^\circ$ et au delà de cet angle, la contribution I_S augmente. De plus, nous remarquons que lorsqu'on rajoute la contribution inter-atomique I_{SS} , l'amplitude a augmenté pour des angles de diffusion ($\theta_d \leq 10^\circ$). On remarque aussi que l'effet d'interaction entre les atomes de la molécule cytosine (le terme I_{SS}) est négligeable devant la contribution du potentiel à courte portée (I_S) pour les angles de diffusion $\theta_d = 45^\circ, \theta_d = 70^\circ, \theta_d = 85^\circ$ et dans les deux gammes de diffusion allant de $\theta_d = 98^\circ$ jusqu'à $\theta_d = 107^\circ$ et $\theta_d = 134^\circ$ jusqu'à $\theta_d = 180^\circ$. Et pour l'énergie incidente $E_i = 70eV$ (la courbe bleu de la figure 2.2.c), on constate que les deux contributions ($|F_L|^2$ et I_{LS}) ont un effet négligeable devant le terme inter-atomique I_{SS} dans la plage angulaire allant de $\theta_d = 20^\circ$ à $\theta_d = 180^\circ$. Concernant la section efficace globale, on remarque que la profondeur des minimas vus pour les deux énergies $E_i = 50 eV$ et $60 eV$ est réduite et l'amplitude de ce terme a aussi diminué à cause de l'influence imposée par la multiple diffusion.

Pour une énergie incidente du projectile $E_i = 90 eV$ (figure. 2. 2. d), le minimum a été observé aux alentours de $\theta_d = 90^\circ$ pour la section efficace statique I_S . Cette dernière (la courbe noir de la figure. 2.2.d) continue à s'élargir à chaque fois qu'on augmente l'énergie de l'électron incident. De plus, on constate que l'influence du terme d'interactions inter-atomique I_{SS} existe toujours pour des faibles angles de diffusion inférieur à 19° . Par contre, cette interaction devient négligeable pour les angles de diffusion $\theta_d = 41^\circ, \theta_d = 61^\circ, \theta_d = 85^\circ, \theta_d = 111^\circ$ et pour θ_d supérieur à 134° . On perçoit aussi que l'effet des termes $|F_L|^2$ et I_{LS} est petit pour des angles de diffusion $\theta_d \leq 19^\circ$ et négligeable au-delà de cet angle de diffusion. Ainsi les termes qui décrivent la multiple diffusion ISD^1 et IDD^0 présentent toujours leurs influences sur toute la gamme des angles de diffusion.

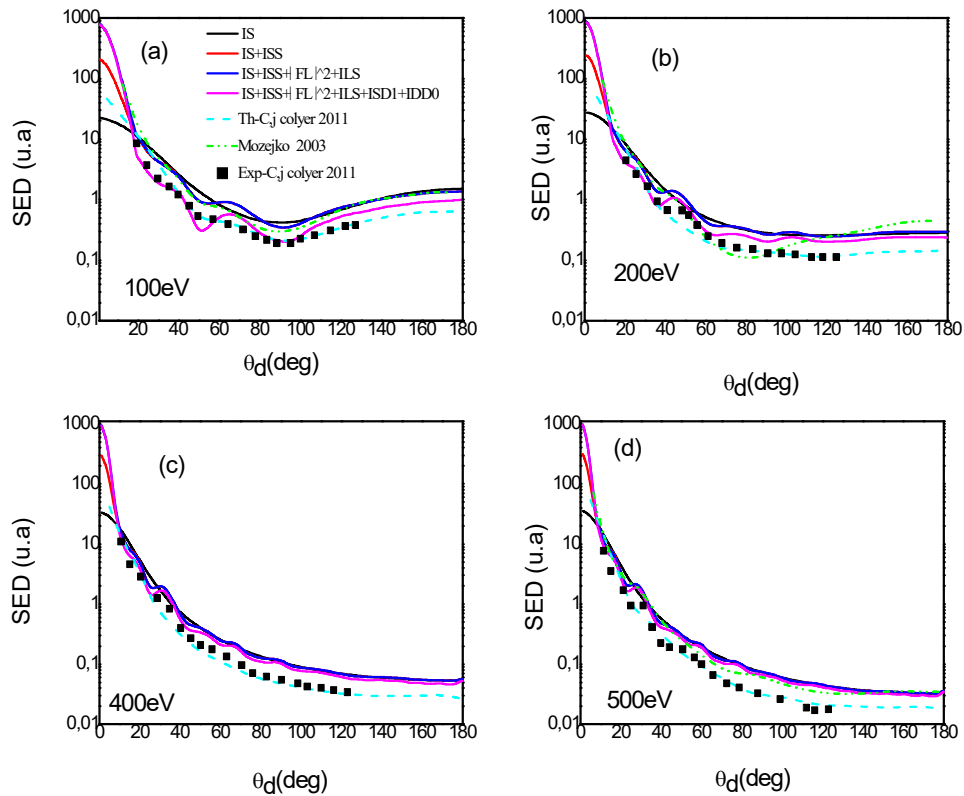


Figure 2.3 – Variation de la section efficace différentielle de la molécule cytosine en fonction de l'angle de diffusion θ_d pour différentes énergies incidentes : 100eV, 200eV, 400eV et 500eV.

D'après la figure (2.3), nous remarquons pour les énergies incidentes de 100eV (figure 2.3.a), 200eV (figure 2.3.b), 400eV (figure 2.3.c) et 500eV (figure 2.3.d), que l'amplitude du terme I_S (la courbe noir) augmente à faibles angles de diffusion $\theta_d < 10^\circ$ et le minimum de ce terme vu pour les énergies de la figure 2.2 s'est aplati pour $E_i = 100 \text{ eV}$, alors qu'il a complètement disparu à partir de $E_i = 200 \text{ eV}$. En outre, l'effet de l'interaction inter-atomique (le terme I_{SS}) devient négligeable avec l'augmentation de l'énergie incidente du projectile pour des angles de diffusion importants. Par ailleurs, la contribution de l'interaction inter-atomique I_{SS} (la courbe rouge) est élevée pour des angles de diffusion inférieurs à $\theta_d = 10^\circ$. Nous constatons aussi que la contribution des termes $|F_L|^2$ et I_{LS} (la courbe bleu) est négligeable sur toute la gamme angulaire supérieur à $\theta_d = 10^\circ$. De plus les effets des potentiels de corrélation, polarisation et d'échange (longue portée) n'ont aucun effet devant le potentiel coulombien pour des énergies

incidentes du projectile supérieures à 100eV et dans la gamme angulaire de diffusion supérieure $\theta_d=10^\circ$.

En supplément, on observe pour une énergie incidente de 100eV (figure 2.3.a), que la section efficace englobant tout les termes physiques (la courbe magenta) présente deux minima aux environs de $\theta_d = 50^\circ$ et $\theta_d = 90^\circ$ avec des profondeurs différentes, tandis que pour une énergie incidente de 200eV (figure 2.3.b), ces minima diminuent de profondeur et les amplitudes diminuent aussi et se rapprochent entre eux pour des angles de diffusion élevés.

Pour des énergies incidentes 400eV (figure 2.3.c) et 500eV (figure 2.3.d), on constate que l'effet des termes ISD^1 et IDD^0 de la diffusion multiple (la courbe magenta) devient très minime et la section efficace différentielle évolue d'une façon monotone avec de légères fluctuations. Enfin, la comparaison des résultats obtenus pour les sections efficaces différentielles de la diffusion élastique par la cytosine avec les résultats expérimentaux et théoriques de Colyer et al. [37] et de Mozejko et al. [36] montre un accord satisfaisant pour énergies de 100eV et 200eV . D'autre part, pour des énergies incidentes de 400eV et 500eV , nos résultats sont en bon accord avec ceux obtenus expérimentalement par Colyer et al. [37] et théoriquement par Mozejko et al. [36].

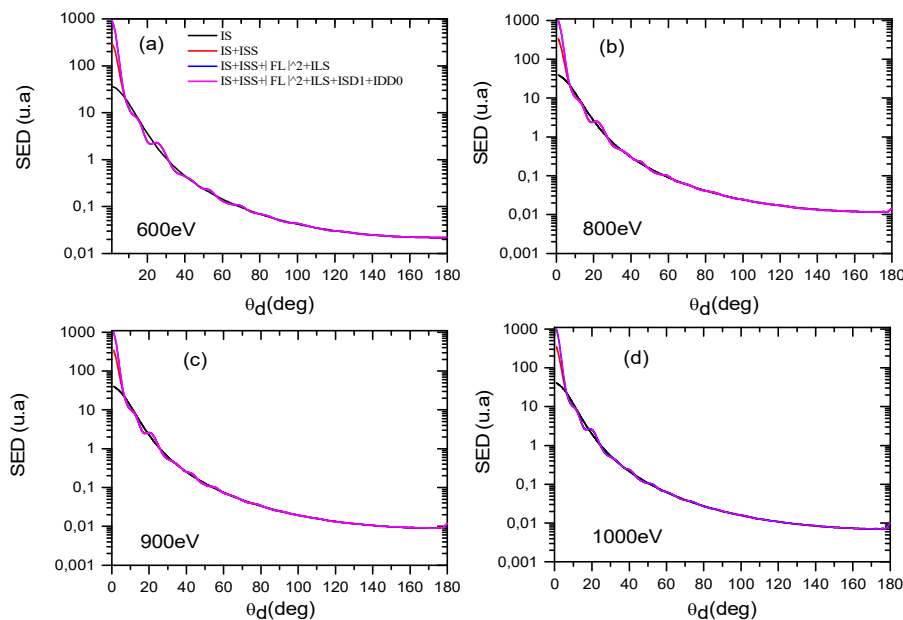


Figure 2.4 – Variation de la section efficace différentielle de la molécule cytosine en fonction de l'angle de diffusion θ_d pour différentes énergies incidentes : 600eV , 800eV , 900eV et 1000eV .

On constate d'après la figure (2.4) qui représente la variation des sections efficaces différentielles de la molécule cytosine en fonction de l'angle de diffusion pour les électrons d'énergies incidentes supérieures à 600 eV que le comportement de ces sections efficaces ressemble à celles mesurées pour la pyrimidine et l'adénine [20,36] pour les mêmes valeurs d'énergie incidente, mais avec l'ordre de grandeur de l'amplitude qui est différent. D'une part, nous observons que les différentes contributions à la section efficace différentielle se ressemblent et cela est dû au fait que les deux contributions de $|F_L|^2$ et I_{LS} sont négligeables devant le terme I_s (courte portée) sur toute la gamme angulaire supérieure à $\theta_d = 5^\circ$. De l'autre part, nous remarquons aussi que la contribution inter-atomique (la courbe rouge) est considérable pour des angles de diffusion inférieurs à 5° et au-delà de cet angle, l'effet de l'interaction entre les atomes de la molécule cytosine devient minimale. Tandis que l'effet des termes de la multiple diffusion ISD^1 et IDD^0 devient négligeable sur toute la gamme des angles de diffusion.

2.4 L'effet de l'angle de diffusion sur sections efficaces différentielles (SED)

Les sections efficaces différentielles (SED) de diffusion élastique d'électrons par des molécules de cytosine ($C_4H_5N_3O$) sont calculées de la même méthode décrite précédemment en fonction de l'énergie incidente de projectile allant de 1eV jusqu'à 50eV pour différentes valeurs d'angle de diffusion θ_d : 25° , 45° , 90° , 135° et 180° . Ces valeurs ont été choisies en se référant à l'article de Regeta et al. [38]. Les différents résultats des sections efficaces obtenus sont représentés sur les figures (2.5.a, 2.5.b, 2.5.c, 2.5.d et 2.5.e).

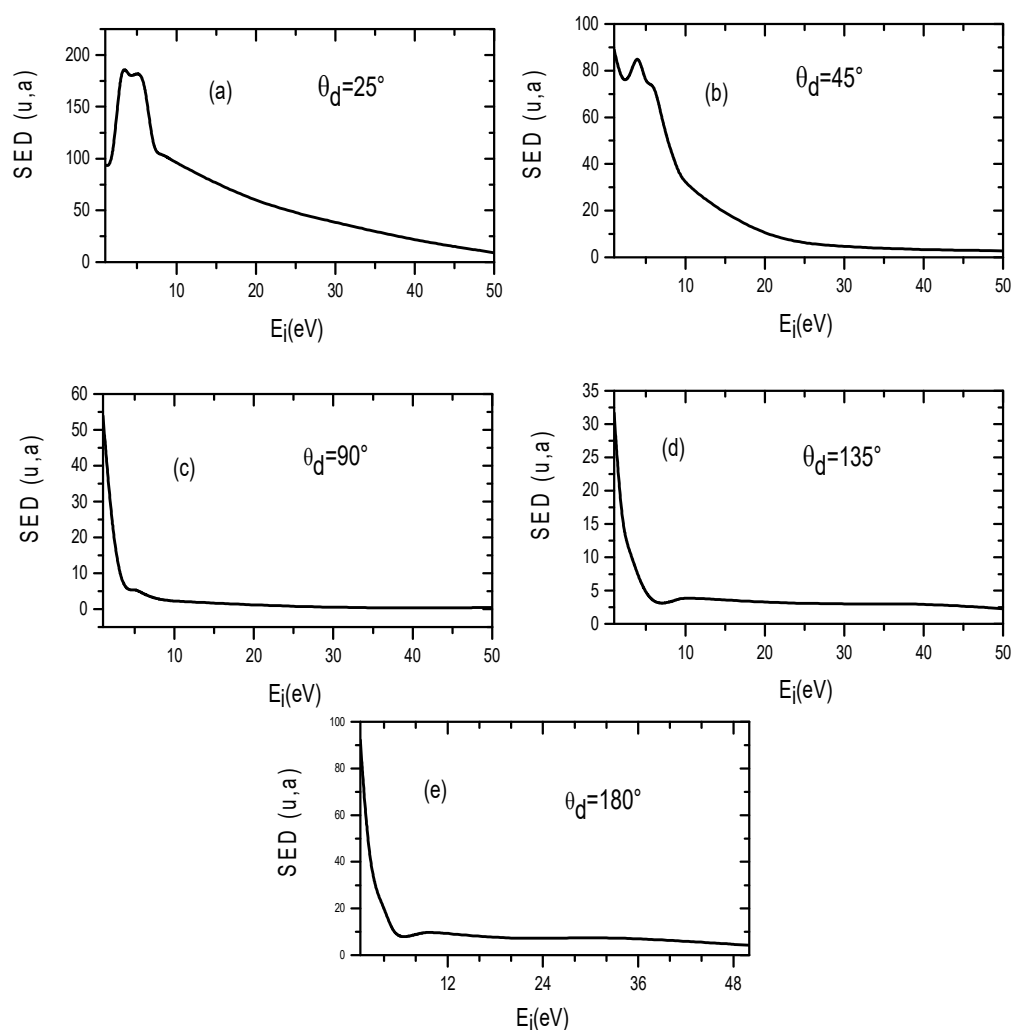


Figure 2.5 – Variation de la section efficace différentielle de la molécule cytosine en fonction de l'énergie incidente pour différents angles de diffusion θ_d : 25°, 45°, 90°, 135° et 180°.

Pour un angle de diffusion $\theta_d = 25^\circ$ (figure 2.5.a), nous observons que l'amplitude de la section efficace augmente en fait et à mesure que l'énergie incidente augmente jusqu'à atteindre un maximum pour $E_i = 3\text{eV}$, ensuite diminue graduellement pour des énergies incidentes élevées.

Pour un angle de diffusion $\theta_d = 45^\circ$ (figure 2.5.b), nous notons que la courbe est maximale à faibles énergies incidentes, puis diminue légèrement jusqu'à arriver à un minimum aux alentours de $E_i = 2\text{eV}$, ensuite augmente à nouveau pour exhiber un maximum à une énergie

incidente $E_i = 4\text{eV}$ et au-delà de cette énergie, l'amplitude de la section efficace diminue pour des énergies importantes.

Dans la direction perpendiculaire de diffusion $\theta_d = 90^\circ$, nous remarquons que la courbe (c) de la figure (2.5) augmente pour des énergies incidentes très faibles, ensuite diminue avec l'augmentation de l'énergie jusqu'à arriver aux environs de $E_i = 30\text{eV}$ et à partir de cette valeur, l'amplitude devient stable.

Pour un angle de diffusion $\theta_d = 135^\circ$ (figure 2.5.d), on observe, pour des énergies incidentes faibles, que l'amplitude de la courbe est maximale puis diminue jusqu'à atteindre un minimum à l'énergie $E_i = 7\text{eV}$ ensuite augmente légèrement pour des énergies allant de 7 à 9eV. Nous notons encore dans les gammes d'énergie allant de 9 à 13eV et de 25 à 41eV que la courbe (d) est stable. Par ailleurs, l'amplitude diminue.

Pour $\theta_d = 180^\circ$ (figure 2.5.e), on constate, pour la courbe (e), presque la même évolution que la courbe (d), sauf que pour des énergies incidentes élevées, l'amplitude de la courbe (e) est quasiment nulle.

2.5 Section efficace intégrale de la molécule cytosine

La section efficace intégrale pour la diffusion élastique électronique de la cytosine a été calculée à l'aide de deux méthodes complémentaires. Pour les énergies d'impact inférieur à 20keV, on a utilisé le modèle des ondes partielles comme étant la base de notre calcul et pour des énergies supérieures à 20keV, la première approximation de Born est utilisée pour les sections efficaces différentielles SED. De plus, la distribution d'énergie de la diffusion élastique a été obtenue en intégrant numériquement les sections efficaces différentielles SED sur l'angle solide de diffusion Ω .

La section efficace intégrale (SEI) obtenue (trait noir plein) est représenté sur la figure (2.6)) pour des énergies incidentes allant de 10eV jusqu'à 5MeV. Comme prévu, l'amplitude est importante à faibles énergies incidentes, puis diminue de façon monotone avec l'augmentation de l'énergie incidente. D'autre part, nous avons rapporté la section efficace intégrale (SEI) prédit par Mozejko et al. [36] (ligne vert en pointillés) et par Blanko et al. [39] (ligne magenta en pointillés) pour la diffusion électronique par la cytosine dans le modèle d'atomes indépendants (MAI) multicentrique.

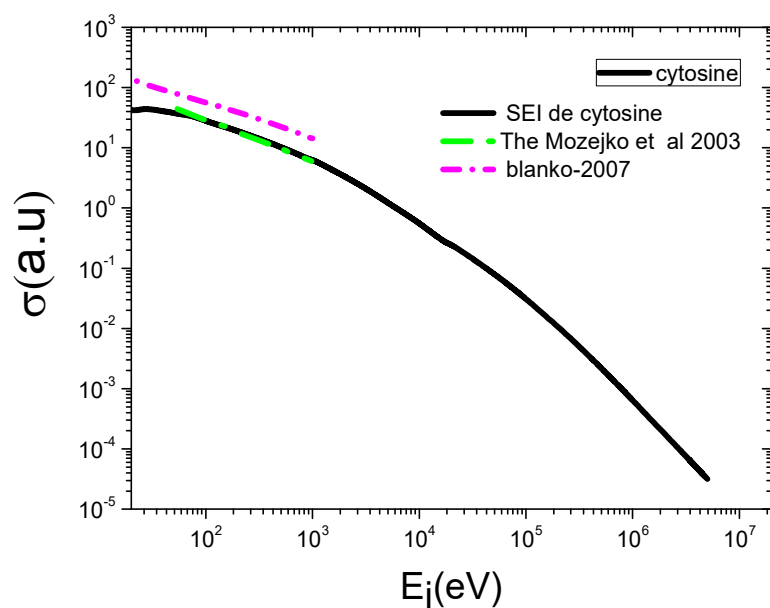


Figure 2.6 – variation de la section efficace intégrale de diffusion élastique par la molécule cytosine en fonction de l'énergie des électrons incidents

La comparaison de nos résultats (trait noir plein) avec le modèle théorique de Mozejko et al. (ligne vert en pointillés), montre un excellent accord. Tandis que la petite déviation observée avec de Blanko (ligne magenta en pointillés) est due au fait que seul le potentiel d'échange est pris en compte, par contre les effets de corrélation-polarisation et de la diffusion multiple sont négligeables.

Conclusion générale

L'objectif principal de ce projet consiste à déterminer les sections efficaces différentielles et intégrales de diffusion élastique par impact d'électrons de la molécule biologique. Pour ce faire, nous nous sommes intéressés à l'interaction d'électrons par la cytosine ($C_4H_5N_3O$) de type base azotée telle que les bases d'acide désoxyribonucléique (ADN). Dans ce mémoire nous avons développé une approche théorique basée sur la première approximation de Born et les ondes partielles (méthode de déphasage). Dans notre démarche, nous avons utilisé une base de fonctions d'ondes très bien choisi (fonctions d'ondes planes) pour décrire les états initial et final du système en interaction.

Le travail présenté est scindé en deux chapitres essentiels. Dans le premier, nous avons commencé par des rappels théoriques sur la diffusion élastique où on a défini les différentes méthodes de calcul des sections efficaces telles que la méthode de déphasages pour les faibles énergies incidentes et la méthode de Born pour des énergies importantes. Par suite, nous avons pris en considération les effets fins tels que la corrélation-polarisation de la molécule par le projectile et l'échange d'électrons, et même la contribution statique issue des fonctions d'ondes moléculaires. En supplément, nous avons rajouté les effets de l'interaction inter-atomique et la diffusion multiple. Finalement, on a clôturé le premier chapitre par la description de la cible biomoléculaire (cytosine).

Dans le second chapitre, nous avons calculé les sections efficaces différentielles (SED) de diffusion élastique d'électron par la molécule cytosine en introduisant les différents phénomènes physiques tels que l'échange, la corrélation-polarisation, l'interaction inter-atomique et la diffusion multiple. Les résultats obtenus ont été rapportés et analysés. D'une part, on a calculé les sections efficaces différentielles en fonction de l'angle de diffusion θ_d , pour des énergies incidentes E_i fixes. Dans ce cas, nous retenons que pour des énergies incidentes inférieures à 200eV, la section efficace due au potentiel statique admet un minimum aux environs de l'angle de diffusion $\theta_d = 90^\circ$ et s'élargit pour des énergies incidentes supérieures à 200eV. On a noté encore que la contribution du terme d'interaction inter-atomique est importante à faibles angles de diffusion $\theta_d \leq 10^\circ$ puis devient négligeable au-delà de cet angle de diffusion, notamment pour des énergies incidentes supérieures à 90eV. Nous avons constaté aussi, pour des énergies incidentes $E_i \leq 500eV$, que les effets des potentiels d'échange

et de corrélation-polarisation sont faibles mais leurs effets deviennent négligeables au-delà de cette énergie. En ce qui concerne le terme de la diffusion multiple, on a observé, à basses énergies incidentes, que son influence est importante, puis commence à diminuer en fonction de la mesure que l'énergie incidente augmente jusqu'à devenir entièrement négligeables pour $E_i > 600\text{eV}$ sur toute la gamme d'angles de diffusion. D'autre part, on a calculé les sections efficaces différentielles (SED) en fonction de l'énergie incidente, pour des angles de diffusion fixes. Nous avons constaté, dans ce cas, que l'évolution de l'amplitude de la section efficace diffère d'un angle à un autre sur toute la gamme énergétique. La variation de la section efficace intégrale sur tout l'angle solide Ω pour des énergies incidentes allant de 10 eV à 5MeV se fait d'une façon monotone avec l'augmentation de l'impact d'énergie incidente. De plus, nous avons constaté un très bon accord avec les résultats expérimentaux et théoriques pour des énergies incidentes allant de 10 eV à 1000 eV. L'originalité de ce travail est, en particulier, le choix de la molécule étudiée qui n'est autre que la cytosine ($C_4H_5N_3O$). A notre connaissance aucune étude (expérimentale), jusqu'à présent, portant sur la diffusion élastique par impact d'électrons de cette molécule. Par ailleurs, pour raffiner les résultats obtenus dans le cadre de ce travail de recherche, il serait très intéressant d'inclure tous les termes du multiple de diffusion et d'autre potentielle d'interaction entre la cible moléculaire et le projectile. Comme perspectives de ce travail, nous envisageons, dans un avenir proche, de déterminer les sections efficaces différentielles et la section efficace intégrale sur l'espace de l'électron diffusé pour d'autre base ADN et ARN, Il faut aussi souligner que ce travail ouvre la voie à d'autres études sur la diffusion élastique par impact de protons, ou de photons, par exemple et sur des molécules biologiques. Enfin, pour mieux valoriser nos résultats, nous souhaitons que des expériences sur la diffusion élastique de molécules soient réalisées dans les meilleurs délais.

Bibliographie

- [1] H Bethe. *An-nalen der Physik*, 397 :325, 1930.
- [2] U Fano. *Annualreview of nuclear Science*, 13 :1, 1963.
- [3] C Peroval, F Debeaufort, A-M Seuvre, B Chevet, D Despre and A Voilley. *Journal of agricultural and foodchemistry*, 51 :3120, 2003.
- [4] C Desrosiers, V Moskvina, AF Bielajew and L Papiez. *Physics in medicine and biology*, 45 :1781, 2000.
- [5] JF Ward. *Radiation research*, 104 :103, 1985.
- [6] S Trajmar, W William and A Kuppermann. *J. Chem. Phys.* 58 :2521, 1973.
- [7] W Hoppe, W Lohmann, H Markl and H Ziegler (eds) *Biophysics*. Springer, Berlin, 1983.
- [8] R.L Warters, KG Hofer, C.R Harris and J.M Smith. *Curr. Top. Radiat. Res. Quart.*, 12 (1977).
- [9] G Baldacchino, V Wasselin-Trupin, S Bouffard, E Balanzat, M Gardés-Albert, D Jore, S Deycard, B Hickel. *Can. J. Physiol. Pharmacol.* 79 :180,2001.
- [10] H Nikjoo and D.T Goodhead. *Phys. Med. Biol.* 36 :229, 1991.
- [11] P Mozejko, EP Denga, A Domaracka and C Szmytkowski. *Phys. Rev. A* 74 :012708, 2006.
- [12] C Winstead, V McKoy and S d'Almeida Sanchez. *J. Chem. Phys.* 127 :085105, 2007.
- [13] X Luo, Y Zheng and L Sanche *J ChemPhys* 140, 155101, 2014.
- [14] I V Chernyshova, E Kontrosh and O B Shpenik *Optics and Spectro* 125, 845, 2018.
- [15] D Sakata, N Lampe, M Karamitros, I Kyriakou, O Belov, M A Bernal, D Bolst, M-C Bordage, V Breton, J M.C. Brown, Z Francis, V Ivanchenko, S Meylan, K Murakami, S Okada, I Petrovic, A Ristic-Fira, G Santin... S Incerti *PhysMedica*, 62, 152, 2019.
- [16] W G Shin, J. Ramos-Mendez, B Faddegon, H N Tran, C Villagrasa, Y Perrot, S Okada, M Karamitros, D Emfietzoglou, I Kyriakou, M C Bordage, D Sakata, S Guatelli, H J Choi, C H Min, S B Lee, and S Incerti *J. App. Phys.* 126, 114301, 2019
- [17] S Tonzani and Ch H Greene. *J. chem. Phys.* 124 :054312, 2006.
- [18] A Dora, L Bryjko, T van Mourik and J Tennyson. *J. phys. B : Atomic, molecular and optical physics*, 45 :175203, 2012.

- [19] WY Beak, MU Bug, and H Rabus. Phys. Rev. A 89 :062716, 2014.
- [20] WY Beak, A Arndt, MU Bug, H Rabus and M Wang. Phys. Rev. A 88 :032702, 2013.
- [21] H Aouchiche, F Medegga, and C Champion. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms, 333 :113, 2014.
- [22] C Champion, H Lekadir, ME Galassi, O Fojon, RD Rivarola, and J Hanssen. Physics in medicine and biology, 55 :6053, 2010.
- [23] A Messiah, Mécanique quantique tome1, ed. Dunod, Paris 1972
- [24] J.C Slater, Vol.2, New-York: McGraw-Hill, 1960.
- [25] P Palihawadana, J Sullivan, M Brunger, C Winstead, V McKoy, G Garcia, F Blanco, and S Buckman. Phys. Rev. A, 84 :062702, 2011.
- [26] WY Beak, A Arndt, MU Bug, H Rabus, and M Wang. Phys. Rev. A, 88 :032702, 2003.
- [27] S Mokrani, H Aouchiche, C Champion. Radiation physics and chemistry, 172 :108735, 2020.
- [28] Sh Hara. Journal of the Physical Society of Japan, 22 :710-718, 1967.
- [29] W Y Baek, M U Bug, H Rabus, E Gargioni, B Grosswendt, Phys. Rev. A 86 032702, 2012.
- [30] N Sanna, F A Gianturco, Computer Phys. Communications 128, 2000.
- [31] M.H Mittleman and K.M Watson. Annals of physics, 10 :268-279, 1960.
- [32] F Salvat. Phys. Rev. A, 68, 2003.
- [33] H Aouchiche, C Champion, and D Oubaziz. Radiation Physics and Chemistry, 77 :107, 2008.
- [34] NT Padial and DW Norcross. Phys. Rev. A, 29 :1742, 1984.
- [35] S Hayashi and K. Kuchitsu, J. Phys. Soc. Jpn **41**, 5 (1976).
- [36] P Mozejko and L Sanche. Radiation and environmental. Biophysics, 42: 201, 2003.
- [37] C.J Colyer, S.M Bellm, F Blanco, G García and B Lohmann. Phys. Rev. A, 84: 042707, 2011.
- [38] K Regeta, M Allan, C Winstead, V McKoy, Z Mašín and J.D Gorfinkiel. J. Chem. Phys. 144: 024301, 2016.
- [39] F. Blanco and G. García, Phys. Let. A, 360: 707, 2007.

Résumé

Dans le présent travail, nous présentons des sections efficaces différentielles et intégrales pour le processus de diffusion élastique d'électrons dans la matière biologique à faibles et hautes énergies, particulièrement dans la cytosine (base azotée) constituant l'ADN et l'ARN. Le traitement de ce problème s'est fait dans un cadre de la physique quantique combinant les deux formalismes: les ondes partielles et l'approximation de Born et fait appel à différents potentiels d'interaction tel que le potentiel électrostatique, l'échange, la polarisation et corrélation ainsi que les interactions les plus fines caractérisent les diffusions multiples de l'électron dans la molécule. Les résultats obtenus par ce modèle mettent clairement en évidence le rôle important que joue les différents potentiels à courte et à grande distance. Ces derniers sont comparés à des données disponibles dans la littérature. Cette comparaison rapporte un bon accord à travers les angles de diffusion et à travers les gammes des énergies considérées dans cette étude.

***Mots clés** : Sections efficaces différentielles et intégrales, diffusion élastique, ADN, ARN...*

Abstract

In the present work, we present both differential and integral cross sections for the elastic scattering process of electrons in biological matter at low and high energies, particularly in the cytosine (nitrogen base) constituting DNA and RNA. The problem treatment is performed within a quantum mechanical framework combining the two formalisms: the partial waves and Born approximation and uses different interaction potentials such as electrostatic potential, exchange, polarization and correlation as well as the finest interactions characterize the multiple scattering of the electron in the molecule. The results obtained by this model clearly demonstrate the important role played by the different short and long range potentials. These results are compared with data available in the literature. This comparison reports good agreement exclusively for the scattering angles and the energy ranges considered in this study

***Key words** : Differential and integral cross sections, elastic scattering, ADN, ARN...*