

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE



UNIVERSITÉ MOULOUD MAMMERRI DE TIZI-OUZOU  
FACULTÉ DES SCIENCES  
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE

Laboratoire de Mécanique, Structure et Énergétiques

## MÉMOIRE DE MASTER

Filière : Physique  
Spécialité : Nano-physique

Présenté par :  
**Kana Tassadit**

Thème

*Calculs des sections efficaces différentielles et totales  
pour les collisions d'électrons avec l'uracile*

Devant le jury d'examen composé de :

Harchaoui	Nadra	Maître de conférence A	U.M.M.T.O. Présidente
Boukellal	Ali	Professeur	U.M.M.T.O. Examineur
Mokrani	Saida	Maître de conférence A	U.M.M.T.O. Encadreur

**Soutenue publiquement le : 17/07/2022**

# Remerciements

Ce travail a été effectué au sein du Laboratoire de Mécanique, Structures et Energétique, de l'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou.

Mes premiers remerciements s'adressent à ma promotrice Mme Mokrani Saida Maitre de Conférences A à l'université de Tizi-Ouzou, pour ses conseils, sa disponibilité et ses qualités humaines qui m'ont permis de mener à bien ce modeste travail.

Je tiens également à remercier l'ensemble des membres du jury pour avoir accepté d'évaluer mon travail de fin d'étude. Merci à Mme. Harchaoui Nadra d'avoir acceptée la présidence du jury de ce projet, à M. Boukellal Ali d'avoir accepté d'examiner ce travail.

Nous exprimons également notre gratitude à tous les enseignants qui ont collaboré à notre formation depuis notre premier cycle d'étude jusqu'à la fin de notre cycle universitaire.

Je tiens aussi à remercier tous ceux qui nous ont apporté leur aide de près ou de loin.

Je tiens à remercier Si Tayeb Belkacem doctant de Mme Mokrani ainsi que tous les membres du Laboratoire de Mécanique, Structures et Energétique pour la bonne humeur qu'ils apportent au sein du Laboratoire.

## **Dédicaces**

Je dédie ce modeste travail à :

Mes chers parents que dieu les protège

Ma promotrice madame Mokrani

Mes chères sœurs

Mes chers frères

Toute ma famille

Et mes amis.

# Table des matières

<b>Introduction général</b> .....	1
<b>Chapitre1: Rappels théoriques sur les collisions élastiques</b>	
1.1 Introduction.....	3
1.2 Section efficace.....	3
1.3 Méthodes de calcul des sections efficaces.....	4
1.3.1 Méthode de déphasage (décomposition en ondes partielles).....	5
1.3.2 Approximation de Born.....	8
1.4 Différents potentiels d'interaction .....	11
1.4.1 Potentiel optique .....	11
1.4.1.1 Densité de charge électronique.....	11
1.4.1.2 Potentiel statique .....	13
1.4.1.3 Potentiel d'échange.....	13
1.4.1.4 Potentiel de corrélation-polarisation.....	13
1.4.1.4.1 Potentiel de polarisation de Buckingham.....	14
1.4.1.4.2 Potentiel de corrélation de Padial et Norcross.....	15
1.5 Section efficace différentielle élastique.....	15
1.6 Section efficace intégrale élastique.....	17
1.7 Description de logiciel Gaussien.....	18
1.8 Structure et composante de l'ARN.....	18
1.9 Structure de la molécule $C_4H_4N_2O_2$ (uracile).....	21
1.9.1 Définition d'uracile.....	21
1.9.2 Modélisation moléculaire.....	22
<b>Chapitre2: Résultats et discussions</b>	
2.1 Introduction.....	26
2.2 Densité électronique.....	26
2.3 Sections efficaces différentielles élastiques (SED).....	27
2.3.1 Sections efficaces différentielles élastiques (SED) en fonction de l'angle de diffusion.....	27

2.3.1.1 Sections efficaces différentielles élastiques (SED) sans les effets de la multiple diffusion.....	27
2.3.1 .2 Sections efficaces différentielles élastiques(SED)avec les effets de la multiple diffusion.....	30
2.3.2 Sections efficaces intégrales élastiques.....	36
<b>Conclusion générale.....</b>	<b>38</b>
<b>Bibliographie.....</b>	<b>40</b>

## Introduction générale

L'interaction des particules chargées avec la matière ont des applications dans nombreux domaines tels que la physique du solide [1,2], le milieu interstellaire [3,4], la radiobiologie [5], la chimie [6] et la médecine [7]. Les expériences de la diffusion consistent à expédier un faisceau incident sur une cible atomique ou moléculaire afin d'étudier les interactions qui existent entre les diverses particules. On distingue deux catégories de diffusion; à savoir la diffusion élastique [8] et la diffusion inélastique [9].

En biologie des rayonnements, l'eau a été largement étudiée par plusieurs chercheurs [10,11] grâce à son abondance dans la matière biologique. Par conséquent, dans le présent travail nous sommes allés plus loin en modélisant le milieu biologique par une molécule plus populaires qui a été étudiée avec des expériences et une théorie de diffusion d'électrons, qui est la molécule d'uracile.

Notre choix est porté sur cette molécule pour son abondance dans la cellule vivante et son utilisation dans de nombreux domaines. En effet, il est clairement reconnu que les acides nucléiques sont des entités sensibles d'un organisme irradié. Les dommages subis par l'influence des rayonnements sur le fonctionnement cellulaire peuvent induire des mutations, cancers ou la morte cellulaire. Réellement, l'irradiation a pour but de détruire les cellules cancéreuses (la radiothérapie). Ainsi, il est donc important de suivre le trajet de la particule incidente dans la matière biologique afin de comprendre en détail l'action des rayonnements et contrôler ses effets.

Plusieurs travaux théoriques et expérimentaux portant sur les collisions élastiques entre les particules chargées et les différentes bases azotées qui composent les acides nucléiques ADN et ARN. Parmi ces travaux théoriques, on peut citer par exemple Wiansted et al [12] qui ont calculés les sections efficaces différentielles élastiques en fonction d'angle de diffusion pour les différentes valeurs d'énergies incidentes en introduisant les potentiels: statique, échange et polarisation. Mentionnant aussi les travaux de Mozejko et al [13] qui ont calculés les sections efficaces différentielles et intégrales de la diffusion élastique des électrons avec les différents bases d'ADN et d'ARN telles que l'adénine, la guanine, la cytosine et l'uracile en utilisant la méthode des atomes indépendants incluant un potentiel statique et de polarisation pour des d'énergies incidentes allant de 50 eV à 4000 eV. Récemment, Moreira et al [14] ont rapportés les sections efficaces intégrales et différentielles élastiques pour les collisions de positrons avec l'uracile ( $C_4H_4N_2O_2$ ) pour les énergies d'impact inférieur à 10 eV. Tandis que, Franz et al [15] ont calculés les sections efficaces

élastiques et inélastiques de rotation et de vibration dues à l'interaction des positrons avec la molécule d'uracile pour des énergies allant de 1 eV à 25 eV. Alors que Gallup et al [16] ont calculés la contribution de la section efficace totale d'uracile en utilisant une combinaison du modèle discret par des éléments finis avec la théorie de la matrice R à basses énergies. En effet, du point de vue expérimental, il n'y a pas de résultats dans la littérature pour la molécule d'uracile, mais il existe des études expérimentales sur une autre molécule similaire à l'uracile qui est la pyrimidine. D'autre part, plusieurs chercheurs ont étudiés la diffusion élastique d'électron par la pyrimidine tel que Maljkovic et al [17] qui ont mesurés les sections efficaces élastiques de la pyrimidine pour des angles de diffusion allant de 30° à 110° dans le domaine des énergies incidentes allant de 30 eV à 300 eV. De plus, Baek et al [18,19] ont mesurés les sections efficaces différentielles élastiques de diffusion d'électrons avec la pyrimidine de manière absolue pour les énergies incidentes allant de 20 eV à 1 keV dans la plage angulaire comprise entre 5° et 135°. Alors que Fuss et al [20] ont rapportés des mesures de la section efficace de diffusion totale du tétrahydrofurane (C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O) pour des énergies comprises entre 50 eV et 5000 eV avec des erreurs expérimentales d'environ 5%. Tandis que en 2014 Fuss et al [21] ont mesurés aussi les sections efficaces totales de pyrimidine (1,3-diazine) et pyrazine (1,4-diazine), dans la gamme d'énergie électronique allant de 8 eV à 500 eV. D'autre part, Fuss et al [22] ont réalisés des simulations sur les particules chargées pour le calcul des dommages induisant par des rayonnements sur les molécules de pyrimidine et d'eau.

Ce rapport de stage est constitué de deux chapitres ; le première est réservé aux aspects théoriques de la diffusion élastique à savoir les différentes méthodes de calcul des sections efficaces élastiques et les différents potentiels utilisées, puis on a défini la cible moléculaire uracile (C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>). Tandis que, le deuxième chapitre est consacré à l'analyse des résultats numériques des sections efficaces différentielles et intégrales élastiques en fonction de l'angle de diffusion et celles obtenues en fonction de l'énergie incidentes afin de montrer l'influence de différents phénomènes physique telle que : l'échange, corrélation-polarisation, interaction inter-atomique et la diffusion multiple. Enfin, on termine par une conclusion générale ou les points les plus importants de ce travail sont consignés.

# Chapitre 1

## Rappels théoriques sur les collisions élastiques

### 1.1 Introduction

Durant le processus de collision, deux types de collision peuvent se produire à savoir, élastique ou inélastique, lors d'une collision, un faisceau de particules incidentes d'énergie  $E_i$  heurte les électrons d'une cible atomique ou moléculaire (la matière biologique). Dans le cas élastique, la structure interne de la cible ne change pas durant la collision, par contre l'énergie des deux particules incidentes et diffusées reste conservée. Alors que dans le cas inélastique, la cible atomique ou moléculaire subit un changement dans sa structure interne, soit par excitation électronique, soit par ionisation simple ou double. L'étude théorique du processus collision a pour but principal la modélisation, d'une manière aussi précise que possible, de la dynamique des systèmes en interaction permettant de bien décrire les observations expérimentales. L'objectif est d'établir une relation entre les états initial et final du système lors d'une collision. Du point de vue quantique, il est bien connu que ceci s'exprime au moyen de l'amplitude de diffusion, cette dernière étant directement reliée aux sections efficaces de collisions, qui sont souvent obtenues par le comportement asymptotique de l'équation stationnaire de la fonction d'onde, étant donné la difficulté à trouver la solution exacte de l'équation de Schrödinger. De plus, les collisions d'atomes ou de molécules par impact de particules chargées est un processus dont l'étude théorique est très compliquée, étant donné des différents potentiels d'interaction qu'existaient durant la collision entre les particules incidentes et matière biologique. La section efficace est une quantité fondamentale pour la description du phénomène de collision ; le calcul de cette quantité est souvent très difficile.

### 1.2 Section efficace

D'un point de vue général, les résultats des expériences de collision élastique [23] et inélastique [24] s'expriment au moyen de quantités, appelées sections efficaces, directement reliées à la probabilité d'interaction entre deux particules dans une réaction donnée. Plus précisément, on définit la grandeur physique sections efficaces comme étant le nombre de particules  $dn$  diffusées par unité de temps  $dt$  dans une petite région angulaire  $d\Omega$  située dans

la direction  $\Omega \equiv (\theta, \varphi)$ . Le nombre de particule  $dn$  est directement proportionnel au courant incidente  $J_{inc}$  et  $d\Omega$  à travers la relation suivante:

$$dn = \frac{d\sigma}{d\Omega} J_{inc} dt d\Omega \quad (1.1)$$

La quantité  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  désignant la section efficace différentielle. En principe,  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  peut dépendre de  $\theta$  et  $\varphi$ , sauf que si le faisceau de particules incidentes est en direction  $(oz)$  et que le potentiel est symétrique sous rotation,  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  dépendra seulement de  $\theta$ .

Les sections efficaces peuvent être totales si la collision est décrite dans sa globalité. Dans ce cas, elle est définie comme une intégrale de  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  sur tous les angles:

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (1.2)$$

La dimension de  $\sigma$  est longueur au carré; l'unité standard est le barn ( $1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$ ).

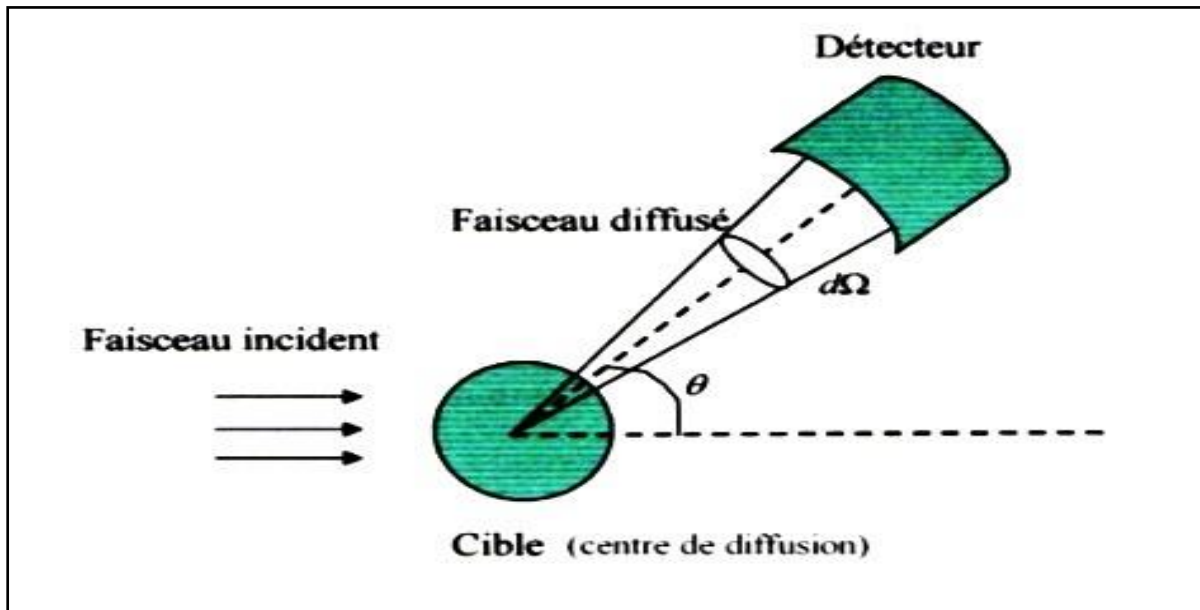


Figure 1.1 : Diffusion d'un faisceau de particules incidentes par une cible moléculaire.

### 1.3 Méthodes de calcul des sections efficaces

On distingue deux méthodes différentes, afin de calculer les sections efficaces selon l'énergie des particules incidentes. En effet dans le cas d'une énergie incidente élevée; la

particule cible n'a subi qu'une simple perturbation par le faisceau incident, et dans ce cas le calcul de la section efficace se fait dans le cadre de l'approximation de Born. Cependant pour des faisceaux de basses énergies incidentes cette approximation n'est plus valide ainsi les sections efficaces sont calculées par une méthode dite des déphasages; utilisant un développement en ondes partielles.

### 1.3.1 Méthode de déphasage (décomposition en ondes partielles)

Considérons la diffusion d'une particule par un potentiel central  $V(r)$ . Pour calculer la section efficace il faut déterminer la forme asymptotique de l'onde stationnaire de diffusion qui peut s'écrire sous la forme [25, 26]:

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{u_l(r)}{r} P_l(\cos \theta) \quad (1.3)$$

Où  $P_l(\cos \theta)$  est le polynôme de Legendre qui est défini par la relation:

$$P_l(\cos \theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} y_l^{m*}(\theta, \varphi) y_l^m(\theta, \varphi) \quad (1.4)$$

Et  $\frac{u_l(r)}{r}$  représente la solution radiale de l'équation de Schrödinger; elle s'écrit sous la forme suivante:

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + \mathcal{E} - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(r) = 0 \quad (1.5)$$

Où  $\mathcal{E} = k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$  est l'énergie de la particule incidente et  $U(r) = \frac{2mV(r)}{\hbar^2}$  est le potentiel d'interaction et  $l$  représente le nombre quantique orbitale associé au moment cinétique orbitale  $\vec{L}$ .

Généralement, le faisceau incident suit le comportement d'une onde plane qui peut s'écrire en fonction des harmoniques sphériques et des fonctions de Bessel sphériques sous la forme suivante:

$$\Psi_{inc} = e^{i\vec{k}\vec{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} i^l j_l(kr) y_l^{m*}(\theta, \varphi) y_l^m(\theta, \varphi) \quad (1.6)$$

Où  $j_l(kr)$  représente la fonction de Bessel sphérique, qui peut être réécrite sous la forme d'une somme de deux fonctions de Hankel sphérique tel que:

$$j_l(kr) = \frac{1}{2} [h_l^1(kr) + h_l^2(kr)] \quad (1.7)$$

Où  $h_l^1$  désigne le comportement asymptotique (grand valeur de  $r$ ) d'une onde entrante définie par :

$$h_l^1(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{i^{(l+1)} e^{-ikr}}{kr} \quad (1.8)$$

Tandis que la fonction  $h_l^2$  se comporte asymptotiquement comme une onde sortante qui s'écrit sous la forme:

$$h_l^2(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{i^{-(l+1)} e^{ikr}}{kr} \quad (1.9)$$

Les particules incidentes sont orientées dans la direction parallèle à l'axe ( $oz$ ) alors:

$e^{i\vec{k}\vec{r}} = e^{ikz}$ , en effet le potentiel central  $V(r)$  à une symétrie sphérique et donc la dépendance en  $\varphi$  va disparaître et le nombre quantique  $m$  s'annule ( $m = 0$ ); alors la fonction d'onde incidente peut s'écrire comme suit:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \frac{h_l^1(kr) + h_l^2(kr)}{2} P_l(\cos \theta) \quad (1.10)$$

Dans la zone d'interaction; l'équation de Schrödinger (1.4) se simplifie pour les grandes valeurs de  $r$  comme suit: lorsque  $r$  tend vers l'infinie le terme centrifuge  $\frac{l(l+1)}{r^2}$  devient négligeable et le potentiel étant à portée finie devient nul aussi; pour cela l'équation radiale donnée par l'expression (1.5) se réduit à:

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + \mathcal{E} \right] u_l(r) = 0 \quad (1.11)$$

Où la forme asymptotique de la fonction radiale  $\frac{u_l(r)}{r}$  à l'infini peut se mettre sous la forme:

$$\frac{u_l(r)}{r} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} i^l \frac{k}{\sqrt{2\pi}} [h_l^1(kr) + S_l h_l^2(kr)] \quad (1.12)$$

Où  $S_l$  désigne la phase de l'onde sortante défini par :

$$S_l = e^{2i\delta_l} \quad (1.13)$$

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

La forme asymptotique de la fonction d'onde complète est donnée par:

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \frac{h_l^1(kr) + e^{2i\delta_l} h_l^2(kr)}{2} P_l(\cos \theta) \quad (1.14)$$

Soustraire la fonction d'onde incidente  $\Psi_{inc}$  donnée par l'équation (1.6) de la fonction d'onde complète (1.14) donne la forme asymptotique de la fonction d'onde sortante:

$$\Psi_{sor}(r, \theta) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \frac{(e^{2i\delta_l} - 1) h_l^2(kr)}{2} P_l(\cos \theta) \quad (1.15)$$

En reportant l'expression de  $h_l^2(kr)$  donnée par (1.9) dans la fonction d'onde sortante (1.15) on obtient:

$$\Psi_{sor}(r, \theta) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{e^{ikr}}{r} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{(e^{2i\delta_l} - 1)}{2ik} P_l(\cos \theta) \quad (1.16)$$

Le facteur  $e^{2i\delta_l}$  donné dans l'équation (1.16) peut s'écrire sous la forme suivant:

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

On remplace le facteur  $e^{2i\delta_l}$  donné par l'expression (1.17) dans l'équation (1.16) on trouve:

$$\Psi_{sor}(r, \theta) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{e^{ikr}}{r} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{(e^{i\delta_l} \sin \delta_l)}{k} P_l(\cos \theta) \quad (1.18)$$

La fonction d'onde sortante (1.18) a un comportement asymptotique qui peut se mettre sous la forme:

$$\Psi_{sor}(r, \theta) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) \quad (1.19)$$

Nous identifions les deux expressions de la fonction d'onde sortante (1.18) et (1.19) nous aboutissons à l'expression de l'amplitude de diffusion  $f(\theta)$ :

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \quad (1.20)$$

Comme la section efficace différentielle de diffusion élastique est définie par le carré de l'amplitude de diffusion, il devient:

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \right|^2 \quad (1.21)$$

### 1.3.2 Approximation de Born

L'approximation de Born est une approximation qui traite la théorie de la diffusion, particulièrement en mécanique quantique, pour des potentiels diffuseurs très peu denses. L'approximation de Born est basée sur le principe de perturbation et permet ainsi d'exprimer cet opérateur de diffusion sous la forme d'un développement en termes de l'opérateur du potentiel d'interaction. D'une façon générale l'ordre correspondant à la série de Born représente le nombre d'interactions de la particule incidente avec la cible: une fois Born 1 si on ne prend que le premier terme du développement et deux fois Born 2 si on prend les deux premiers termes...etc. Alors l'approximation de Born au premier ordre consiste à ne tenir compte que de l'onde incidente et des ondes diffusées par une seule interaction avec le potentiel dans la description de l'onde diffusée totale. Considérons l'équation de Schrödinger sous la forme suivante:

$$(\Delta + k^2) \Psi_k(r) = U(r) \Psi_k(r) \quad (1.22)$$

On a alors, la fonction d'onde  $\Psi_k(r)$  est un état stationnaire de diffusion qui peut s'écrire sous la forme [25, 26]:

$$\Psi_k^{dif}(\vec{r}) = \Psi_0(\vec{r}) + \int d^3 \vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \Psi_k^{dif}(\vec{r}') \quad (1.23)$$

Où  $G(\vec{r} - \vec{r}')$  est appelée la fonction de Green qui peut se mettre sous la forme suivante:

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (1.24)$$

Lorsque  $r$  tend vers l'infini, la fonction de Green (1.24) a un comportement asymptotique qui est donnée par:

$$G(\vec{r} - \vec{r}') \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r} e^{-i\vec{k}_d\vec{r}'} \quad (1.25)$$

Où  $\vec{k}_d$  est le vecteur d'onde de diffusion.

La forme asymptotique de la fonction d'onde de diffusion totale suggère de choisir la fonction d'onde incidente  $\Psi_0(\vec{r})$  comme une onde plane telle que:

$$\Psi_0(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i\vec{r}} = e^{ik_i z} \quad (1.26)$$

On remplace la fonction d'onde incidente donnée par l'équation (1.26) dans (1.23), la fonction  $\Psi_k^{dif}(\vec{r})$  de la diffusion devient sous la forme:

$$\Psi_k^{dif}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i\vec{r}} + \int d^3 r' G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \Psi_k^{dif}(\vec{r}') \quad (1.27)$$

En faisant un changement de  $\vec{r} \rightarrow \vec{r}'$  et  $\vec{r}' \rightarrow \vec{r}''$  dans l'équation (1.27) il devient:

$$\Psi_k^{dif}(\vec{r}') = e^{i\vec{k}_i\vec{r}'} + \int d^3 \vec{r}'' G(\vec{r}' - \vec{r}'') U(\vec{r}'') \Psi_k^{dif}(\vec{r}'') \quad (1.28)$$

On reporte l'expression de la fonction de diffusion (1.28) dans l'équation (1.27), on obtient ainsi le développement de Born:

$$\begin{aligned} \Psi_k^{dif}(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}_i\vec{r}} + \int d^3 \vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') e^{i\vec{k}_i\vec{r}'} + \int d^3 \vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \\ &\quad \times \int d^3 \vec{r}'' G(\vec{r}' - \vec{r}'') U(\vec{r}'') \Psi_k^{dif}(\vec{r}'') \end{aligned} \quad (1.29)$$

Si le potentiel d'interaction est faible, le troisième terme du second membre est de plus en plus petit de telle sorte qu'on peut le négliger devant les deux premiers. En remplaçant la

fonction de Green (1.25) dans l'expression (1.29) après avoir considéré cette approximation, on obtient:

$$\Psi_k^{dif}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i\vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r} \int e^{-i\vec{k}_d\vec{r}'} U(\vec{r}') e^{i\vec{k}_i\vec{r}'} d^3\vec{r}' \quad (1.30)$$

Si on considère le vecteur d'onde  $\vec{k} = \vec{k}_d - \vec{k}_i$  qui n'est autre que le moment de transfert lors de la collision, l'expression d'onde totale (1.29) devient:

$$\Psi_k^{dif}(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\vec{k}_i\vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r} \int e^{-i\vec{k}\vec{r}'} U(\vec{r}') d^3\vec{r}' \quad (1.31)$$

Nous identifions les deux expressions de la fonction d'onde stationnaire (l'onde de diffusion totale) donnée par l'expression (1.31) à celle donnée par Tanoudji (p-900, §B-9) [26] nous aboutissons à l'expression de l'amplitude de diffusion  $f(\theta)$ :

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\vec{k}\vec{r}'} U(\vec{r}') d^3\vec{r}' = \langle \Psi_i(r, k_i) | U(r) | \Psi_f(r, k_d) \rangle \quad (1.32)$$

Ce terme  $f(\theta)$  est appelé première approximation de Born; il décrit le passage de la particule incidente de son état initial  $\Psi_i(r, k_i)$  de moment  $k_i$  vers un état final  $\Psi_f(r, k_d)$  de moment  $k_d$ . Dans ce cas, on ne tient compte que d'une seule interaction de la particule incidente avec la cible atomique ou moléculaire.

La section efficace différentielle de diffusion est simplement reliée dans l'approximation de Born à la transformée de Fourier du potentiel. Cependant, si l'on utilise l'expression de potentiel  $U(r) = \frac{2mV(r)}{\hbar^2}$  on obtient:

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int d^3r e^{-i\vec{k}\vec{r}} V(r) \right|^2 \quad (1.33)$$

Notons que pour effectuer le calcul de la section efficace de diffusion à haute et à basse énergie on utilise deux méthodes différentes (méthode de déphasage et Approximation de Born); et nous devons connaître le potentiel d'interaction entre la cible atomique ou moléculaire et les particules chargées.

## 1.4 Différents potentiels d'interaction

### 1.4.1 Potentiel optique

D'une façon générale, les chercheurs utilisent ce potentiel afin d'étudier les différentes interactions qui existent entre les particules chargées incidentes et les cibles atomique ou moléculaire. Alors le potentiel optique est une grandeur physique complexe qui peut se mettre sous la forme suivante:

$$V_{\text{optique}}(r) = V_R(r) + iV_i(r) \quad (1.34)$$

Où  $V_R(r)$  représente le potentiel optique réel qui permet de bien traiter la diffusion élastique des électrons par des cibles sphériques ou non-sphériques [27]; cependant le potentiel  $V_R(r)$  est composé d'un trio de termes essentiels donnée par Jain [28]:

$$V_R(r) = V_{sta}(r) + V_{ec}(r) + V_{c-p}(r) \quad (1.35)$$

Où  $V_{sta}(r)$  désignant le potentiel statique,  $V_{ec}(r)$  le potentiel d'échange et  $V_{c-p}(r)$  le potentiel de corrélation-polarisation. Les deux premiers termes sont exprimés en fonction de la densité de charge électronique de la molécule cible, tandis que le dernier terme dépend particulièrement du moment dipolaire. Le potentiel optique imaginaire  $V_i(r)$  représente la diffusion inélastique (absorption) [27]. Avant d'explicitier chacun de ces termes, nous devons d'abord introduire la notion de densité de charge électronique, car elle représente la quantité la plus importante dans le calcul de ces potentiels d'interaction.

#### 1.4.1.1 Densité de charge électronique

La densité de charge électronique est calculée à partir des fonctions d'ondes atomiques de Slater par la méthode CNDO (Complete Neglect of differential overlap) chaque orbitale moléculaire est décrite sous forme de combinaison linéaire d'orbitales atomiques de Slater, ainsi la fonction d'onde moléculaire associée à l'orbitale  $i$  s'écrit sous la forme:

$$\Psi_i(r) = \sum_{j=1}^{N_i} a_{ij} \phi_{n_{ij}l_{ij}m_{ij}}^{\xi_{ij}}(r) \quad (1.36)$$

Où  $N_i$  est le nombre d'orbitale atomique de Slater,  $a_{ij}$  le poids statique correspondant.

Le terme  $\varphi_{n_{ij}l_{ij}m_{ij}}^{\xi_{ij}}(r)$  représente la fonction d'onde d'orbitale atomique qui peut se mettre sous forme d'un produit d'une fonction radiale  $R_{n_{ij}l_{ij}}^{\xi_{ij}}(r)$  et d'une harmonique sphérique  $y_{l_{ij}}^{m_{ij}}(\theta, \varphi)$ :

$$\varphi_{n_{ij}l_{ij}m_{ij}}^{\xi_{ij}}(r) = R_{n_{ij}l_{ij}}^{\xi_{ij}}(r)y_{l_{ij}}^{m_{ij}}(\theta, \varphi) \quad (1.37)$$

Les différents nombres quantiques ( $n_{ij}l_{ij}m_{ij}$ ) ainsi le coefficient  $\xi_{ij}$  sont nécessaire à la description de l'état atomique. La partie radiale  $R_{n_{ij}l_{ij}}^{\xi_{ij}}(r)$  de chaque orbitale atomique est donnée par l'expression suivante [29]:

$$R_{n_{ij}l_{ij}}^{\xi_{ij}}(r) = \frac{(2\xi_{ij})^{n_{ij}+\frac{1}{2}}}{\sqrt{2n_{ij}!}} r^{n_{ij}-1} e^{-\xi_{ij}r} \quad (1.38)$$

Sachant que les harmoniques sphériques sont normalisés et la densité de probabilité de présence n'est rien d'autre que le carré de la partie radiale de la fonction d'onde atomique. Nous faisons la somme des différentes contributions de chaque orbitale atomique afin d'obtenir la distribution totale de la densité de charge d'un atome  $i$  de la molécule, on écrit alors:

$$\rho_i(r) = \sum_{j=1}^{N_i} |R_{n_{ij}l_{ij}}(r)|^2 \quad (1.39)$$

D'où la densité de charge de la molécule peut se mettre comme suit:

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N \rho_i(r) \quad (1.40)$$

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

### 1.4.1.2 Potentiel statique

C'est le potentiel d'interaction coulombien entre les électrons incidents et les différentes charges de la cible atomique ou moléculaire (noyaux et électrons), son expression est donnée par Reid et Wadehra [30], et elle est évaluée suivant la loi de Colomb sous forme:

$$V_{sta}(r) = \sum_{i=1}^N \frac{-Z_i}{r_i} + 4\pi \int \frac{\rho(r)}{r_{>}} r^2 dr \quad (1.41)$$

Le premier terme est lié à la contribution d'un potentiel ionique, tandis que le deuxième terme est lié à la contribution électronique de l'atome  $i$  dans la molécule cible.

Où  $Z_i$  est le nombre d'électrons pour chaque atome  $i$  de la cible et  $r_i$  représente la distance entre les noyaux des atomes de la cible,  $r_{>} = \max(r, r')$ , tandis que  $\rho(r)$  est la densité de charge électronique de la molécule cible.

### 1.4.1.3 Potentiel d'échange

Lors d'une collision élastique [31, 32] où inélastique [33, 34], l'électron incident peut prendre la place d'un électron éjecté par la molécule cible, ainsi nous ne pouvons pas le prédire à cause de l'indiscernabilité des électrons (l'électron diffusé peut être l'électron incident ou celui éjecté par la molécule cible). Afin de décrire ce phénomène, on introduit un potentiel dit d'échange qui a été utilisé pour le calcul des sections efficaces à basse énergie incidente. Son expression est donnée par Furness-McCarthy [35] en fonction de l'énergie incidente  $E_i$  et la densité de charge électronique  $\rho(r)$  sous la forme suivante:

$$V_{e,FM}(r) = \frac{1}{2} \left( E_i - V_{sta}(r) - \sqrt{(E_i - V_{sta}(r))^2 + 4\pi\rho(r)} \right) \quad (1.42)$$

Où  $V_{sta}(r)$  est le potentiel statique.

### 1.4.1.4 Potentiel de corrélation-polarisation

Ce type de potentiel est caractérisé par deux phénomènes physiques; l'un est lié au potentiel de corrélation qui traduit l'interférence entre le faisceau d'électron incident et le nuage électronique de la molécule cible. Tandis que l'autre correspond à la polarisation de la molécule due à la création d'un moment dipolaire. Lorsque le projectile est suffisamment loin de la molécule cible, on a le potentiel de polarisation le plus dominant quand l'interférence

avec le nuage électronique est faible. Cependant, on peut distinguer deux régions: dans la première zone la polarisation domine, alors que dans la deuxième les deux potentiels sont de la même grandeur voir même la corrélation est plus importante que la polarisation. Afin de déterminer la frontière entre ces deux zones il suffit de calculer tout d'abord la distance pour laquelle les deux potentiels se croisent. En effet, il existe plusieurs formes de potentiel de corrélation-polarisation, et parmi ceux que nous utilisons le long de ce travail.

#### 1.4.1.4.1 Potentiel de polarisation de Buckingham

L'effet de polarisation est décrit par un potentiel de type Buckingham donné par l'expression suivante:

$$V_{P,B}(r) = -\frac{a_d}{2(r^2 + d^2)^2} \quad (1.43)$$

Où  $a_d$  est la polarisabilité moyenne électrique de la molécule,  $d$  est le paramètre de seuil empêchant la divergence du potentiel au point  $r = 0$ . Son expression est donnée par Mittleman et Watson [36] sous la forme:

$$d = \left( \frac{1}{2} a_d Z^{-\frac{1}{3}} b_{pol}^2 \right)^{\frac{1}{4}} \quad (1.44)$$

Où  $b_{pol}$  est un paramètre ajustable qui dépend de l'énergie incidente, son expression est donnée par Salvat [37] comme suit :

$$b_{pol} = \sqrt{\max \left\{ \frac{(E_i - 50 \text{ eV})}{16 \text{ eV}} ; 1 \right\}} \quad (1.45)$$

Et elle est améliorée par Aouchiche et al. [38]:

$$b_{pol} = \sqrt{\max \left\{ \frac{(E_i - 0.5 \text{ eV})}{0.01 \text{ eV}} ; 1 \right\}} \quad (1.46)$$

#### 1.4.1.4.2 Potentiel de corrélation de Padial et Norcross

Pour décrire les effets de corrélation, on utilise le potentiel qui a été proposé par Padial et Norcross [39] qui dépend uniquement du paramètre de densité  $r_s$ . Padial et Norcross ont définis ce type de potentiel en trois régions par des expressions différentes selon la valeur de ce paramètre  $r_s$ .

$$V_{cor}(r_s) = \begin{cases} 0.0311 \log(r_s) + 0.006 r_s \log(r_s) - 0.015 r_s - 0.058 & \text{Si } r_s \leq 0.7 \\ -0.07356 + 0.02224 \log(r_s) & \text{Si } 0.7 \leq r_s \leq 10 \\ \frac{-0.584}{r_s} + 1.988(r_s)^{-3/2} - 2.450 r_s^{-2} - 0.733 r_s^{-5/2} & \text{Si } r_s \geq 10 \end{cases} \quad (1.47)$$

Où le paramètre de densité  $r_s$  est le rayon de la sphère occupé par la charge de chaque électron est définie par:

$$r_s = \left( \frac{3}{4\pi\rho(r)} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (1.48)$$

### 1.5 Section efficace différentielle élastique

La section efficace différentielle est définie comme étant la somme des différentes contributions dues aux différents potentiels intervenants entre la particule chargée incidente et la cible moléculaire, son expression peut se mettre sous la forme suivante:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = I_S + I_L + I_{LS} + I_{SS} + I_{SD}^{(1)} + I_{SD}^{(2)} + I_{DD}^{(0)} \quad (1.49)$$

Où le premier terme de l'équation (1.49) désignant le module carré de l'amplitude de diffusion de l'atome  $i$  qui est donnée par l'expression (1.20) lorsqu'un potentiel statique intervient dans l'équation de Schrödinger. Son expression est donnée par:

$$I_S = \sum_{i=1}^N |f_i|^2 \quad (1.50)$$

Si un potentiel de corrélation-polarisation et un potentiel d'échange interviennent dans l'équation de Schrödinger, on aboutit à l'expression de l'amplitude de diffusion  $f_i$ ; le module carré de  $f_i$  donne le deuxième terme de l'équation (1.49) qui s'écrit comme suit:

$$I_L = |f_l|^2 \quad (1.51)$$

La prise en compte de l'interférence entre les deux potentiels à courte portée et à longue portée donne le troisième terme de l'équation (1.49) qui peut se mettre sous la forme suivante:

$$I_{LS} = 2 |f_l| \sum_{i=1}^N |f_i| \cos(\eta_l - \eta_i) \frac{\sin(KR_i)}{KR_i} \quad (1.52)$$

Sachant que  $\eta_l$  et  $\eta_i$  représentent respectivement les phases des amplitudes de diffusion  $f_l$  et  $f_i$ ,  $R_i$  indique la position de l'atome  $i$  dans le centre de masse de la molécule; et  $K$  le module de moment de transfert qui est définie par:

$$K = 2 K_i \sin \frac{\theta}{2} \quad (1.53)$$

Où  $K_i$  est le nombre d'onde de l'électron incident.

En tenant compte des interactions entre les atomes au sein de la molécule cible, on obtient alors le quatrième terme de l'équation (1.49) qui est donnée par l'expression suivante:

$$I_{SS} = \sum_{i \neq j}^N f_i^* f_j \frac{\sin(KR_{ij})}{KR_{ij}} \quad (1.54)$$

Où  $f_i$  et  $f_j$  sont respectivement les amplitudes de diffusion des atomes  $i$  et  $j$ , ainsi  $R_{ij}$  est la distance inter-atomique (entre l'atome  $i$  et  $j$ ).

L'effet de la diffusion multiple doit être incorporé puisqu'une telle cible à plusieurs centres diffuseurs (molécule à plusieurs atomes). L'interférence entre la simple et la double diffusion donne le cinquième terme de l'équation (1.49) [8, 40]:

$$I_{SD}^{(1)} = \frac{i}{k} \sum_{i \neq j}^N (f_i + f_j)^* \sum_{l_1 l_2 l_3} (2l_1 + 1)(2l_2 + 1)(2l_3 + 1) \times \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 P_{l_2}(\cos \theta) j_{l_3}^2(kR_{ij}) A_{l_1}(k, j) A_{l_2}(k, i) \quad (1.55)$$

Le sixième terme de l'équation (1.49) décrit la section efficace de diffusion multiple et il définit aussi l'interférence entre la simple et la double diffusion de l'ordre 2; il est donné par l'expression suivante [8, 40]:

$$\begin{aligned}
I_{SD}^{(2)} &= \frac{4\pi i}{k} \sum_{i \neq j \neq k}^N f_k^* \sum_{\substack{l_1, l_2, l_3 \\ l_4, l_5, m_3}} i^{l_3, l_4 + l_5} (-1)^{m_3} (2l_1 + 1)(2l_2 + 1)^{0.5} (2l_4 + 1)(2l_5 + 1)^{0.5} (2l_3 + 1) j_{l_3}^2(kR_{ij}) \\
&\quad \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & -m_3 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_4 & l_5 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_4 & l_5 & l_3 \\ 0 & -m_3 & m_3 \end{pmatrix} Y_{l_2}^{-m_3}(\theta, 0) j_{l_4}(kR_{ij}) \\
&\quad P_{l_5}(\cos \varphi_{ijk}) j_{l_5}(2kR_{ij} \sin \frac{\theta}{2}) Y_{l_5}^{-m_3}(0.5(\pi - \theta), 0) A_{l_1}(k, j) A_{l_2}(k, i)
\end{aligned} \tag{1.56}$$

Le dernier terme de l'équation (1.49) décrit l'interférence entre le double diffusion, il est donné par l'expression suivante [8, 40]:

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

Avec  $A_l(k, i)$  est définie par l'expression:

$$A_l(K_i, i) = e^{i \delta_l^{(i)}} \sin \delta_l^{(i)} \tag{1.58}$$

Sachant que:  $\delta_l^{(i)}$  est le déphasage de l'atome  $i$  et  $j_l(kR_{ij})$  désignant la fonction de Bessel

Tandis que  $\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$  sont les symboles de  $3j$  de Wigne.

## 1.6 Section efficace intégrale élastique

La section efficace intégrale  $\sigma(E)$  décrit la réaction globale de diffusion élastique, elle est définie comme étant le nombre total de particules diffusées par unité de temps. Elle s'obtient en intégrant les sections efficaces différentielles sur tout l'angle solide  $\Omega$  de l'électron diffusée, son expression est donnée par:

$$\sigma(E) = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin(\theta) d\theta \quad (1.59)$$

## 1.7 Description de logiciel Gaussien

De nombreux chimistes, biochimistes et physiciens, et bien d'autres ont optés pour Gaussien, qui est un logiciel de chimie numérique, basé sur le travail de John Pople et collaborateurs [41, 42] qui consistait à développer des simplifications dans l'équation de Schrödinger dans le but de la rendre aisément applicable à l'étude des molécules aussi bien simples que complexes. Le nom de ce logiciel vient de l'utilisation des fonctions gaussiennes pour représenter les orbitales atomiques pour accélérer le calcul. La dernière version (Gaussien 09) disponible de ce programme mondialement reconnu pour ses capacités de premier plan pour la modélisation électronique de structure chimique, disponible pour la majorité des systèmes d'exploitation (Windows, Linux...), il est basé sur les lois de la mécanique quantique. Généralement le Gaussien considéré comme étant le meilleur logiciel de modélisation moléculaire comprend de manière générale les modules de construction, visualisation et manipulation des molécules. Ce modèle peut être appliqué à des composés qui sont difficiles ou impossibles à observer expérimentalement par exemple: des intermédiaires de courte durée et les structures de transition. Le Gaussien 09 permet aussi de calculer les spectres de vibrations, les propriétés électroniques de la molécule à savoir les diagrammes énergétiques et les orbitales frontières HOMO-LUMO. Il met en place des calculs, simple et direct, et même des techniques complexes qui sont entièrement automatisés.

## 1.8 Structure et composante de l'ARN

L'acide ribonucléique (ARN) est un acide nucléique présent pratiquement chez tous les êtres vivants et aussi chez certains virus (les virus à ARN peuvent provoquer diverses maladies humaines telles que la maladie à virus Ebola, le SRAS, la grippe, l'hépatite C, la fièvre du Nil occidental, la rougeole...etc). L'ARN est un polymère linéaire constitué d'un enchaînement de nucléotides, comme est illustrée dans la figure (1.2). Chaque nucléotide contient un groupe phosphate, un sucre (ribose) et une base azotée. Les nucléotides se lient les uns aux autres par l'intermédiaire des groupes phosphate. Le groupe phosphate d'un nucléotide (lié au carbone 5') se rattachant par l'intermédiaire de liaisons phosphodiester au niveau du carbone 3' du nucléotide, voir la figure (1.3).

L'acide ribonucléique (ARN) est constitué de quatre nucléotides qui sont répétés de façon non aléatoire, selon les quatre bases azotées de l'ARN, qui sont classées en deux types: Les purines, correspondantes aux bases Adénine (A) et Guanine (G). Les pyrimidines, comprenant les bases Uracile (U) et Cytosine (C). L'ARN se trouve dans les cellules vivantes sous la forme monocaténaire (simple brin), contrairement à l'ADN qui est sous forme d'un double brin. Alors les brins d'ARN se replient sur eux-mêmes, formant une structure intramoléculaire qui peut être très stable et très compacte. La base de cette structure est la formation d'appariements internes, entre bases complémentaires (A avec U, G avec C et parfois, G avec U). La description des appariements internes entre les bases d'un ARN s'appelle la structure secondaire. Cette structure secondaire peut être complétée par des interactions à distance qui définissent alors une structure tridimensionnelle ou structure tertiaire. Les acides ribonucléiques (ARN) présentes dans les cellules sont plus courts que l'ADN du génome, leurs tailles varient de quelques dizaines à quelques milliers de nucléotides, contre quelques millions à quelques milliards de nucléotides pour l'acide désoxyribonucléique (ADN). L'ARN se produit par transcription à partir de l'ADN, il est donc une copie d'une région de l'un des brins de l'ADN. Les enzymes qui effectuent la copie ADN → ARN s'appellent des ARN polymérases. Alors, les ARN produit peuvent avoir trois grands types de fonctions: ils peuvent être supports de l'information génétique d'un ou plusieurs gènes codant des protéines, on parle alors d'ARN messagers, ils peuvent adopter une structure secondaire et tertiaire stable et accomplir des fonctions catalytiques comme l'ARN ribosomique, ils peuvent enfin servir de guide ou de matrice pour des fonctions catalytiques accomplies par des facteurs protéiques (par exemple le cas des micro-ARN).

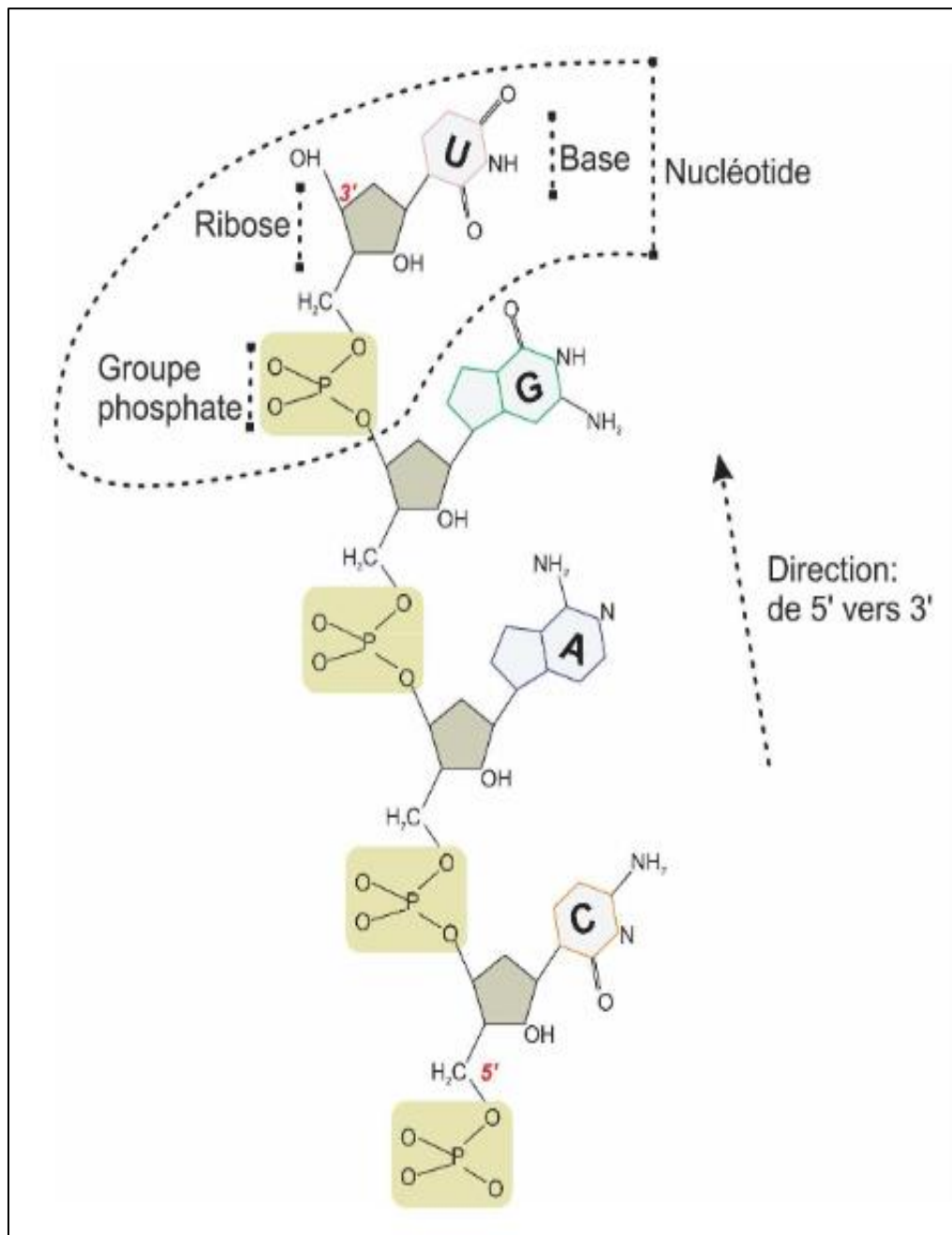


Figure 1.2: Structure de brin d'acide ribonucléique (ARN).

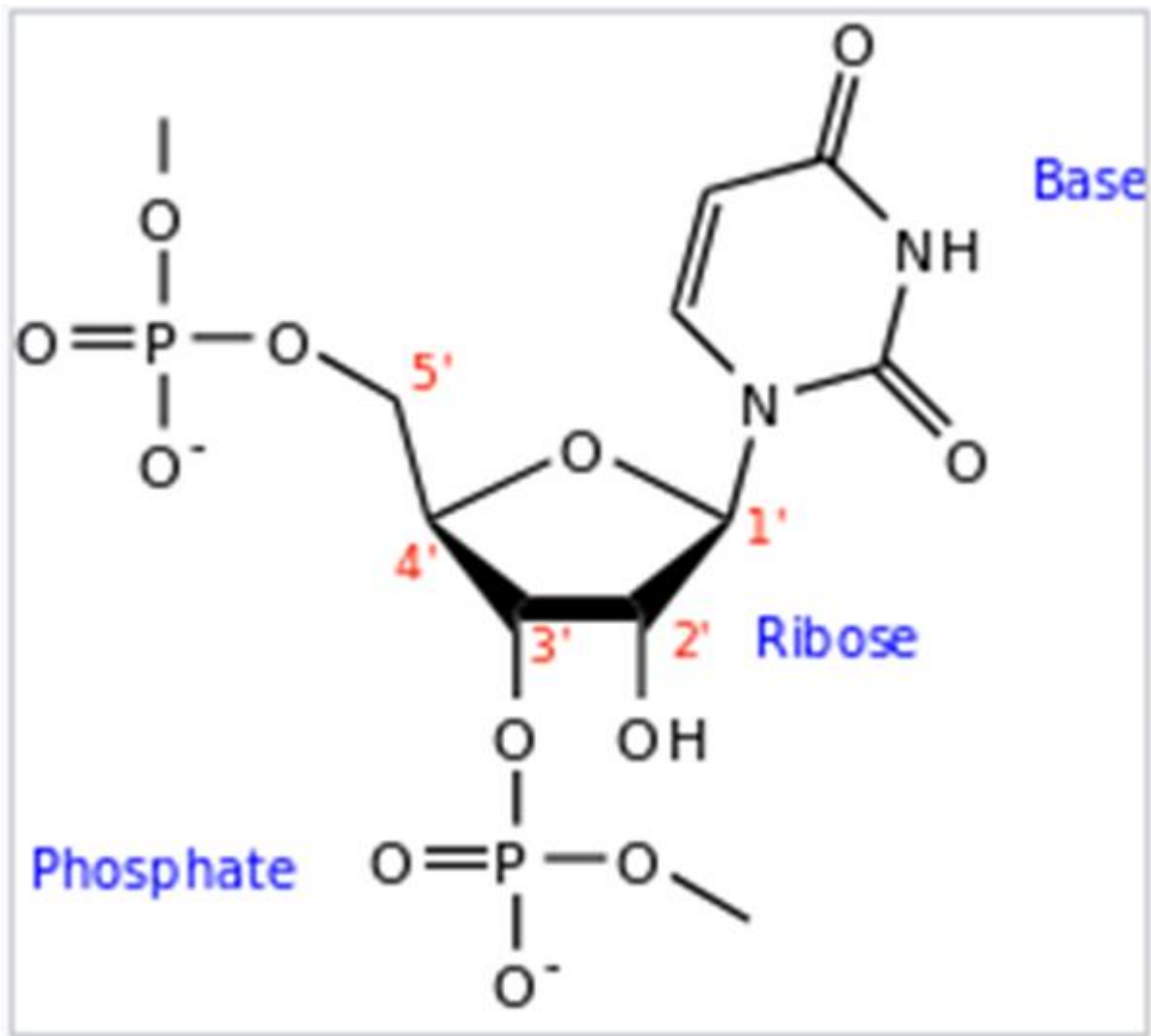


Figure 1.3 : Structure d'un nucléotide dans l'ARN

## 1.9 Structure de la molécule $C_4H_4N_2O_2$ (uracile)

### 1.9.1 Définition d'uracile

L'uracile est une base organique azotée de la famille des pyrimidines entrant dans la structure des acides nucléiques et l'une des quatre bases (azotées) faisant partie de l'ARN et dans le code génétique est représenté par la lettre U. L'uracile remplace la thymine dans l'ARN, qui est l'une des quatre bases azotées qui composent l'ADN.

Comme la thymine, l'uracile est toujours associé à l'adénine par deux liaisons d'hydrogène, mais il lui manque le groupe méthyle. Il forme le nucléoside uridine (avec l'acide uridylique) et le nucléotide uridylylate. L'uracile a été découvert en 1900. Il a été isolé par hydrolyse de

l'acide ribonucléique de la levure présente dans certains organes du bétail : thymus et rate, ainsi que dans le germe de blé.

L'uracile peut servir à des fins thérapeutiques anti tumorales: l'hydrogène du carbone 5 du cycle va être remplacé par un élément halogéné (fluor F, chlore Cl, brome Br, iode I) par exemple le regroupement de fluor avec uracile on obtient le médicament de 5-Fluorouracile (5-FU) qui sert à la chimiothérapie. De plus les traitements avec 5-fluorouracile (5-FU) ou la capécitabine sont importants et efficaces, utilisés pour soigner de nombreux cancers depuis plusieurs décennies.

### 1.9.2 Modélisation moléculaire

Dans cette partie du travail nous avons effectué les calculs avec la méthode d'Hartrée Fock (HF) en utilisant le logiciel Gaussien version 2009 pour déterminer la structure de la molécule uracile ( $C_4H_4N_2O_2$ ) et ces propriétés physiques. Cependant nous avons effectué les calculs avec la base standard 3-21G du logiciel Gaussien. Alors la première étape de calcul est de trouver la structure de la molécule la plus stable. Les résultats de l'énergie de stabilité de la molécule sont illustrés sur le tableau suivant:

Méthode	HF(3G-21)
Energie	-410.1631 (u.a)

Tableau 1.1: L'énergie stabilité de la molécule uracile

La géométrie de la molécule  $C_4H_4N_2O_2$  a été optimisée en état fondamental par la méthode Hartree Fock, en utilisant la base 3-21G. La structure optimisée de la molécule uracile est illustrée sur la figure (1.4) avec le nom de la molécule.

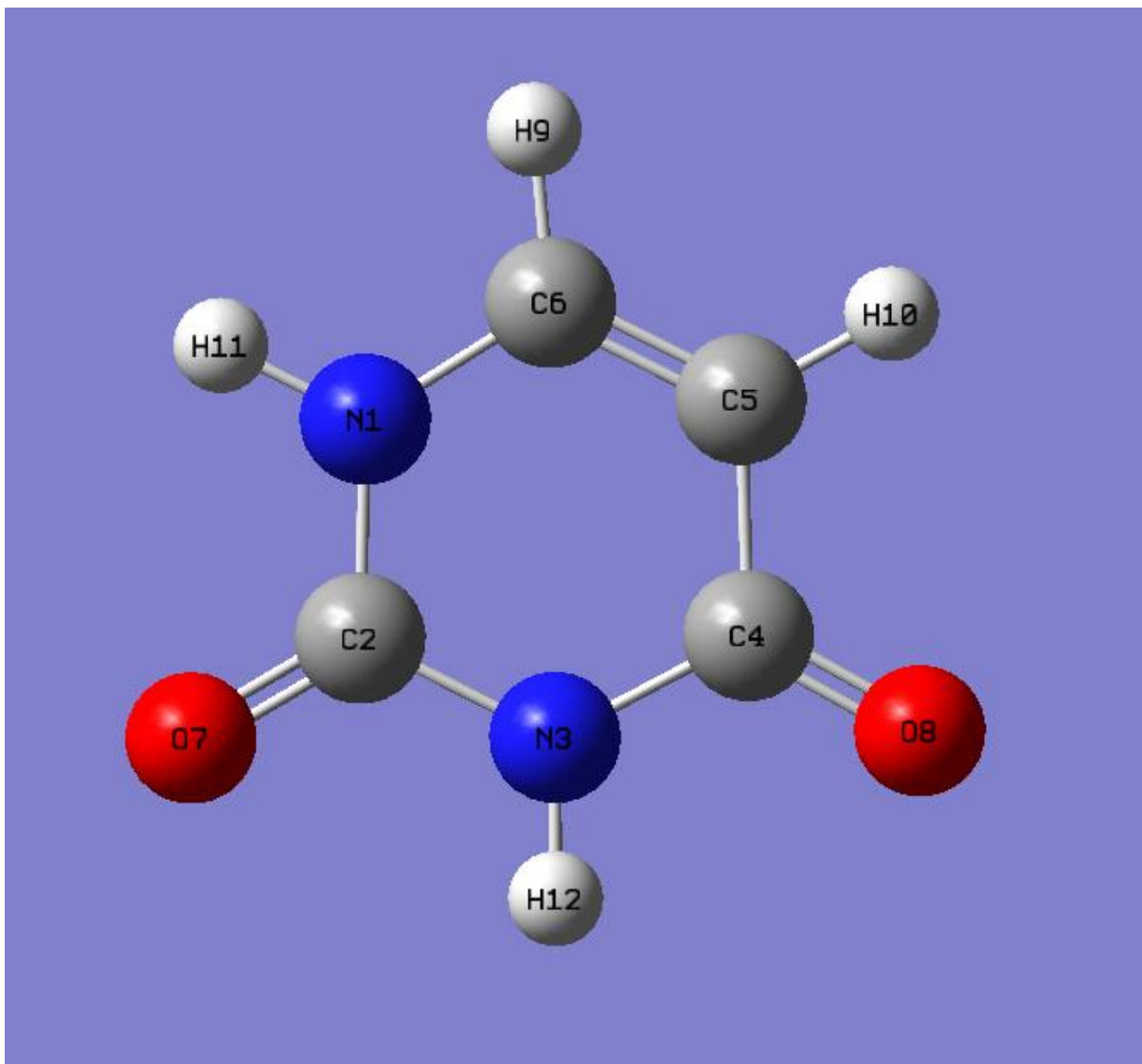


Figure 1.4: Structure optimisée de la molécule uracile avec le logiciel Gaussien 09

Cependant les positions des atomes de la molécule uracile obtenues par modélisation moléculaire sont regroupées dans le tableau (1.2.). Cette molécule contient 29 orbitales moléculaires occupées et 51 orbitales moléculaires non occupées comme sont montrés dans les deux figures (1.5, 1.6).

Atomes	x	y	z
N	-1.16803	0.98214	0.00014
C	-1.21238	-0.39579	-0.00008
N	0.02994	-0.97919	-0.00043
C	1.27615	-0.35187	0.00004
C	1.19494	1.10271	-0.00012
C	0.00833	1.69438	-0.00008
O	-2.25051	- 1.01975	0.00018
O	2.29676	- 1.00493	0.00032
H	-0.09997	2.75811	-0.00003
H	2.10636	1.65494	-0.00024
H	-2.05093	1.44726	0.0005
H	0.03903	-1.9801	-0.00076

Tableau 1.2: Positions des atomes de la molécule uracile (Angströms)

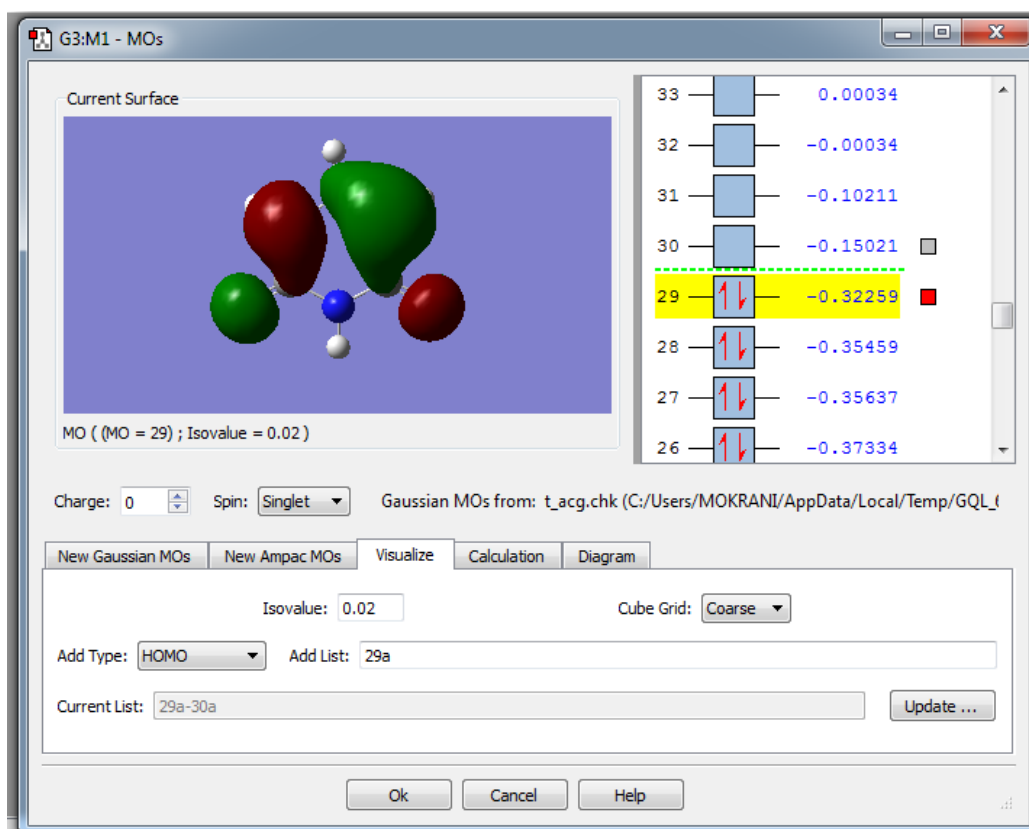


Figure 1.5: L'orbitale moléculaire le plus haute occupée (HOMO)

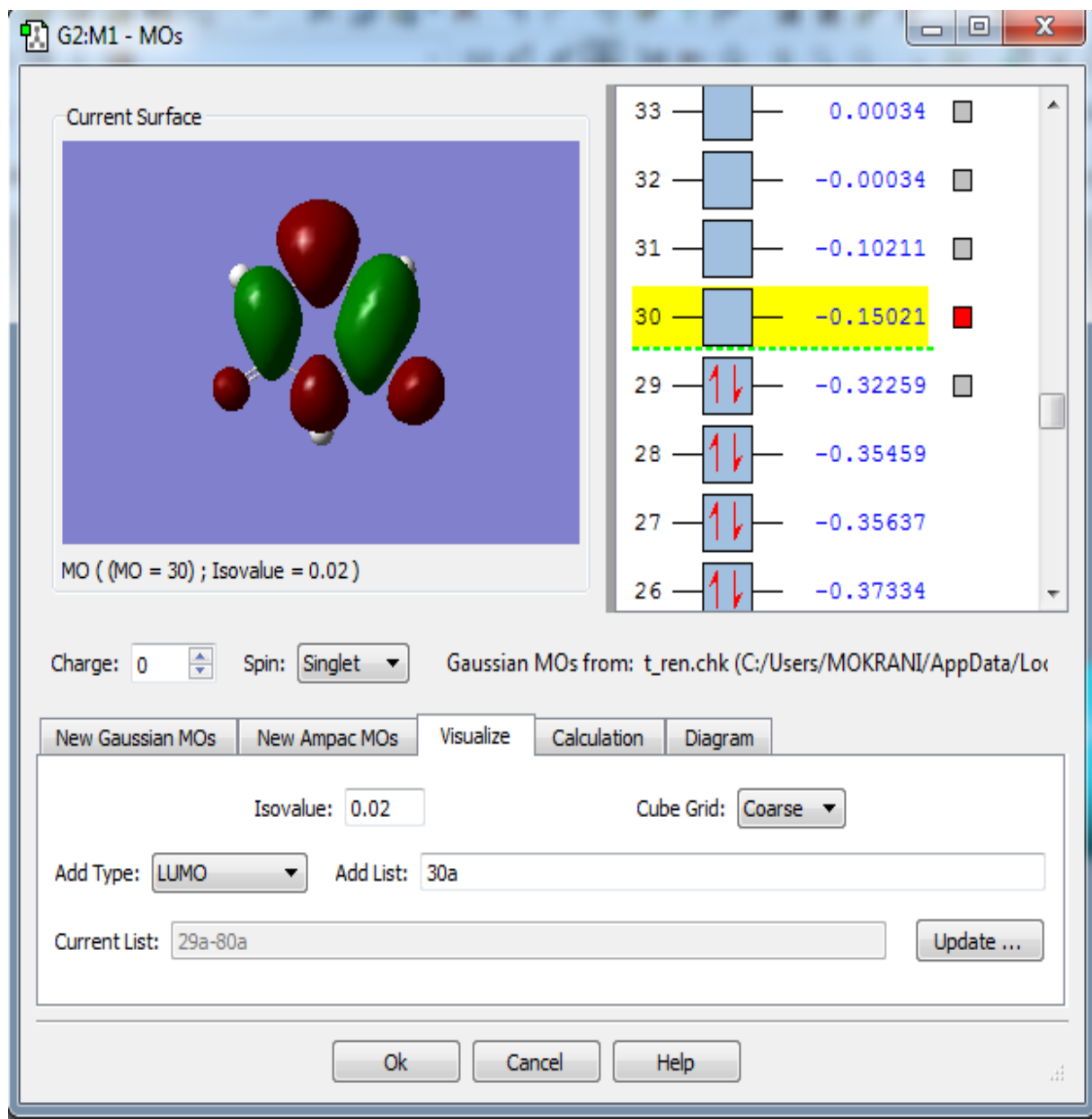


Figure 1.6: L'orbitale moléculaire le plus basse non occupée (LUMO)

## Chapitre 2

### Résultats et discussions

#### 2.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons l'ensemble des résultats obtenus sur le calcul des sections efficaces différentielles et intégrales élastiques de la molécule uracile par impact d'électrons. Le but étant, d'une part est de calculé la surface irradiée pour chaque potentiel d'interaction intervenait lors d'une collision élastique entre la cible moléculaire (uracile) et le faisceau incident (les électrons). Cette présente étude peut être décomposée en deux parties: la première concerne l'étude des sections efficaces différentielles élastiques en fonction de l'angle de diffusion avec et sans effet de la multiple diffusion. La seconde partie est réservée à l'étude des sections efficaces élastiques intégrales en fonction de l'énergie incidente allant de 20 eV à 100 keV.

#### 2.2 Densité électronique

La densité de charge électronique est calculée à partir des fonctions d'ondes atomiques de type Slater par la méthode CNDO pour chaque atome de la molécule d'uracile ( $C_4H_4O_2N_2$ ) comme elle est déjà présentée dans la partie (1.4.1.1) de chapitre 1. Par simulation, on obtient la figure ci-dessus (2.1) qui représente la distribution de charge électrique par unité atomique de la molécule uracile en fonction de la distance radiale.

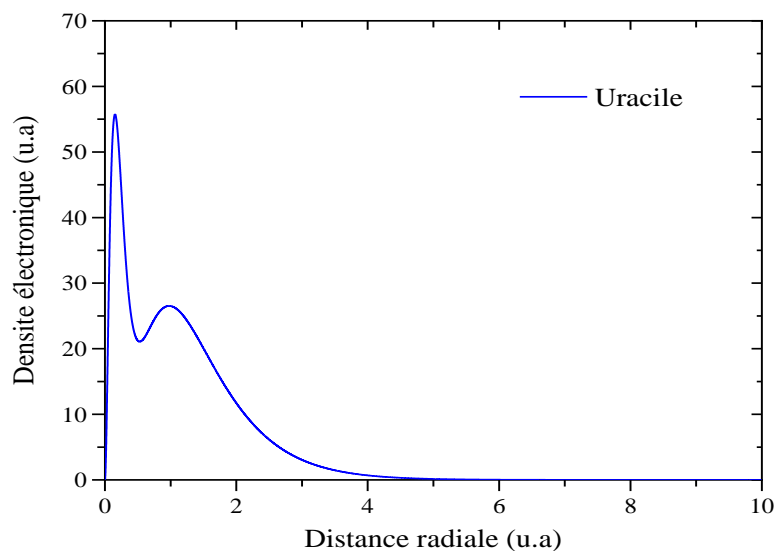


Figure 2.1: Densité de charge électronique  $\rho(r)$  en fonction de la distance radiale  $r$ .

D'après la figure (2.1) on remarque que la distribution des électrons sur la molécule ( $C_4H_4O_2N_2$ ) présente deux maximums situés autour de  $r \approx 0.14$  u. a et  $r \approx 0.98$  u. a, ce qui montre l'existence d'une accumulation de charge et un minimum autour de  $r \approx 0.50$  u. a. On constate que la distribution ne montre aucune valeur significative au-delà de la distance radiale  $r \gtrsim 4.3$  u. a, donc la densité devient quasiment nulle et prend la forme d'une asymptote. On dit que l'interaction électron- uracile se limite à une distance  $r \lesssim 4.3$  u. a.

## **2.3 Sections efficaces différentielles élastiques (SED)**

Les différentes figures ((2.2), (2.3), (2.4) et (2.5)) représentent les sections efficaces différentielles de diffusion élastique obtenues par impact d'électrons sur la molécule uracile qui sont calculés en utilisant le model d'atomique indépendant (MAI) et la méthode de décomposition en ondes partielles (voir la partie (1.3.1) de chapitre1). Cette méthode a été utilisée avec succès par Aouchiche et collaborateurs pour l'étude des composants des cellules vivantes tel que: l'eau [38], l'adénine, la cytosine, la guanine, la thymine [8]. Dans ce travail il est impossible de présenter toutes les sections efficaces différentielles pour toutes les valeurs d'énergie, dans ce cas notre choix est porté sur les valeurs d'énergie incidente dont des travaux expérimentaux et théoriques existent dans la littérature. À nos connaissances, aucune donnée expérimentale concernant les sections efficaces différentielles élastiques des électrons n'est disponible dans la littérature sur cette cible. Pour cette raison nos résultats sont comparés avec les données expérimentales disponibles pour une molécule similaire à celle d'uracile qui est la pyrimidine. Les résultats ont été obtenus par l'utilisation des différentes contributions dues aux différents potentiels d'interaction entre la cible d'uracile et les particules chargées (électrons).

### **2.3.1 Sections efficaces différentielles élastiques (SED) en fonction de l'angle de diffusion.**

#### **2.3.1.1 Sections efficaces différentielles élastiques (SED) sans les effets de la multiple diffusion.**

Nous avons calculé les sections efficaces différentielles élastiques pour différents potentiels intervenant dans la collision entre la molécule d'uracile et les particules chargées (électrons) à des très faibles valeurs d'énergies incidentes (1 eV, 2 eV, 5 eV, 10 eV, 15 eV et 20 eV) par le model d'atomes indépendants. L'ensemble des résultats obtenus par ce calcul sont représentés dans la figure (2.2) suivante:

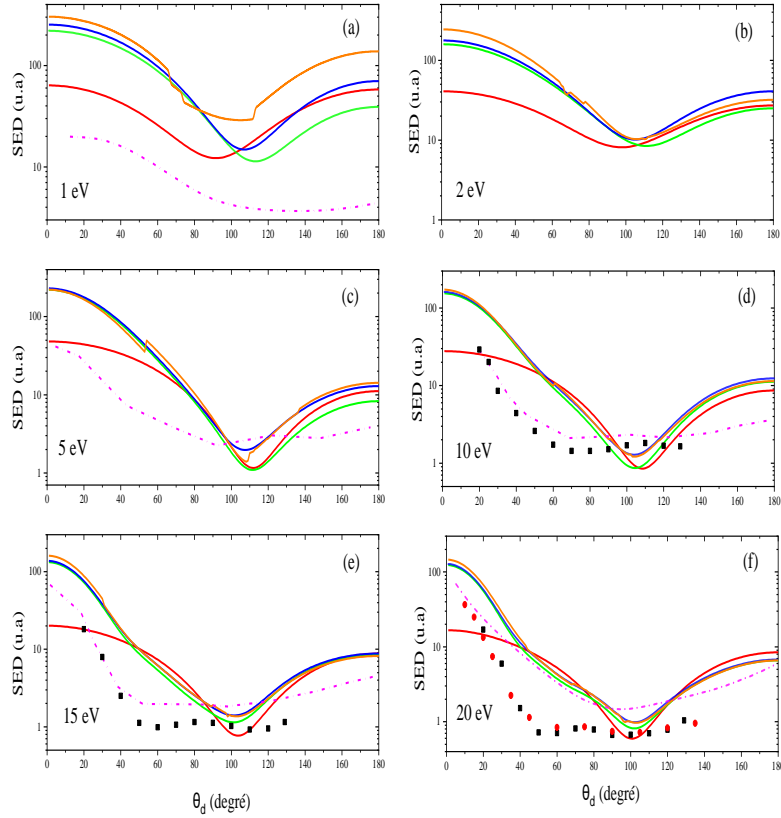


Figure 2.2: Variation des sections efficaces différentielles de la molécule uracile ( $U ; C_4H_4O_2N_2$ ) en fonction de l'angle de diffusion  $\theta_d$  pour les énergies incidentes (1eV, 2eV, 5eV, 10eV, 15eV et 20eV). La ligne rouge continue, la ligne verte continue, la ligne bleue continue et ligne orange continue représentent la section efficace différentielle correspondante à  $I_S$ ,  $I_S + I_{SS}$ ,  $I_S + I_{SS} + I_L$  et  $I_S + I_{SS} + I_L + I_{LS}$  respectivement (voir équation (1.49)). Les prédictions théoriques et expérimentales disponibles tirées de la littérature sont rapportées à titre de comparaison par: Baek et al [18] (cercles pleins rouges), Paliwadana et al [43] (carrés pleins noirs) pour la molécule pyrimidine et la ligne magenta en pointillée tiret court provient de la théorie de Winstead et al [12] pour la molécule d'uracile.

Les différentes courbes des figures (a, b, c, d, e et f) qui sont représentées dans la figure 2.2 suivent le même comportement durant tout l'intervalle d'angle de diffusion  $\theta_d$  pour les différentes valeurs d'énergies utilisées  $E_i$ .

D'après la figure (2.2.a), lorsqu'on introduit uniquement le terme principale  $I_S$  (courbe rouge) pour l'énergie incidente  $E_i = 1\text{eV}$ , on constate que l'amplitude est importante pour les angles de diffusion  $\theta_d \lesssim 17^\circ$ , puis diminue jusqu'à atteindre un minimum aux environs de  $\theta_d \approx 97^\circ$ , et par la suite la section efficace différentielle augmente. En supplément, lorsqu'on rajoute la contribution inter-atomique  $I_{SS}$  (courbe verte) l'amplitude augmente et devient plus

importante que la contribution de  $I_S$  pour les faibles angles de diffusion. On perçoit à  $\theta_d \approx 102^\circ$ , l'effet de la contribution  $I_{SS}$  devient négligeable (intersection des deux courbes rouge et verte). De plus le minimum qui a été observé dans la courbe de  $I_{SS}$  déplace aux alentours de  $\theta_d \approx 113^\circ$  et au-delà de cet angle l'amplitude augmente mais devient faible devant celle de  $I_S$ . On remarque aussi que pour  $\theta_d \lesssim 17^\circ$  l'amplitude augmente légèrement lorsque on rajoute la contribution  $I_L$  (courbe bleue) et la profondeur de minimum diminue et se déplace pour se situer aux alentours  $\theta_d \approx 107^\circ$ . Alors que dans la gamme angulaire comprise entre  $\theta_d \approx 84^\circ$  à  $\theta_d \approx 94^\circ$  l'effet de cette contribution est négligeable devant  $I_S$  et n'a subi aucun effet devant  $I_{SS}$  pour  $\theta_d \approx 137^\circ$ . Le rajout du terme  $I_{LS}$  (courbe orange) induit une augmentation de l'amplitude de diffusion sur toute la gamme angulaire, par contre le minimum vu précédemment s'élargit et aussi décalé vers le haut.

La figure (2.2.b) montre que l'amplitude due au terme statique  $I_S$  (courbe rouge) est importante pour les angles de diffusion  $\theta_d \lesssim 17^\circ$  et pour l'énergie  $E_i = 2 \text{ eV}$ , décroît aussitôt pour atteindre un minimum autour de  $\theta_d \approx 97^\circ$ , et par la suite prend un sens croissant. Lorsqu'on rajoute la contribution inter-atomique  $I_{SS}$  (courbe verte) l'amplitude augmente et le minimum se déplace pour se situer aux alentours  $\theta_d \approx 111^\circ$ . Tandis que l'effet de cette interaction devient négligeable pour  $\theta_d \approx 106^\circ$ . De plus, lorsqu'on rajoute la contribution  $I_L$  (courbe bleue) l'amplitude augmente tandis que le minimum se déplace pour se situer autour de  $\theta_d \approx 105^\circ$ , ainsi la contribution  $I_{LS}$  (courbe orange) induit une augmentation de l'amplitude puis décroît à partir de  $\theta_d \approx 114^\circ$  et son effet devient négligeable autour de la zone de minimum.

Pour une énergie incidente  $E_i = 5 \text{ eV}$  (figure (2.2.c)), nous constatons que les courbes obtenues se superposent dans certains intervalles et se séparent dans d'autres. La courbe rouge, montre que l'amplitude relative au terme statique  $I_S$  est importante dans la région d'angle de diffusion  $\theta_d \lesssim 17^\circ$ , puis diminue pour atteindre un minimum aux environs de  $\theta_d \approx 112^\circ$  et au-delà de cet angle la contribution de  $I_S$  augmente. Nous remarquons aussi, le rajout de la contribution  $I_{SS}$  (courbe verte) induit une augmentation de l'amplitude pour les faibles angles de diffusion et l'influence de cette dernière devient négligeable pour  $\theta_d \approx 76^\circ$ . L'apparition du terme  $I_L$  induit une augmentation dans l'amplitude, alors que la profondeur de minimum diminue et décalée vers le haut pour se situer aux environs de  $\theta_d \approx 107^\circ$ . De plus, lorsqu'on rajoute la contribution  $I_{LS}$  le minimum continu a diminué alors l'influence de ce

terme devient négligeable pour  $\theta_d \approx 53^\circ$  et  $\theta_d \approx 95^\circ$  et dans la gamme  $\theta_d \approx 118^\circ$  à  $\theta_d \approx 137^\circ$ .

Pour une énergie incidente  $E_i = 10$  eV (figure (2.2.d)), on constate que l'amplitude des trois contributions  $I_{SS}$ ,  $I_L$  et  $I_{LS}$  augmente et se superpose dans la zone d'angle  $\theta_d \lesssim 54^\circ$ . De plus, l'effet des contributions  $I_L$  et  $I_{LS}$  devient négligeable par rapport à celui de  $I_{SS}$  dans cet intervalle, tandis que la profondeur des minima liés aux différents termes se décale vers le haut pour se localiser autour de  $\theta_d \approx 103^\circ$ , mais celui de  $I_S$  est situé autour de  $\theta_d \approx 108^\circ$ .

D'après les figures (2.2.e) et (2.2.f) on constate que la contribution du terme  $I_S$  (courbe rouge) est toujours significative à faible angle de diffusion. Alors que les trois contributions  $I_S$  et  $I_{SS}$  et  $I_{LS}$  sont négligeables devant la contribution  $I_L$  dans l'intervalle  $[\theta_d \approx 70^\circ, \theta_d \approx 130^\circ]$  et cela est dû au fait que le potentiel à longue portée est supérieur aux autres dans cet intervalle pour l'énergie 20 eV, par contre pour 15 eV la contribution de  $I_{LS}$  est plus importante que  $I_S$ ,  $I_{SS}$  et  $I_L$  dans la zone de diffusion allant de  $\theta_d \approx 82^\circ$  à  $109^\circ$ . Cependant, pour l'énergie 20 eV, l'effet des différents termes devient négligeable devant celui de  $I_S$  aux voisinages de  $\theta_d \approx 44^\circ$ ,  $\theta_d \approx 74^\circ$  et  $\theta_d \approx 117^\circ$ . Tandis que pour  $E_i = 15$  eV l'effet des termes  $I_{SS}$  et  $I_L$  et  $I_{LS}$  devient négligeable autour de  $\theta_d \approx 46^\circ$  et  $\theta_d \approx 83^\circ$ .

La comparaison entre nos résultats et les différentes données expérimentales montre que nos sections efficaces différentielles varient d'une manière similaire à celles rapportées par Palihawadana et al [43] et Baek et al [18] de la molécule de pyrimidine. Alors que dans les résultats de Winstead et al [12] on constate une différence dans l'ordre de grandeur et cela est dû au fait que Winstead et al [12] n'a pas introduit le potentiel de corrélation dans le calcul des sections efficaces élastiques

### **2.3.1.2 Sections efficaces différentielles élastiques (SED) avec les effets de la multiple diffusion**

Nous avons calculé les sections efficaces différentielles élastiques avec les effets de la multiple diffusion pour différentes valeurs d'énergie 50 eV, 60 eV, 80 eV, 100 eV, 200 eV, 400 eV, 600 eV, 800 eV et 1000 eV par la méthode de déphasage. Pour la même raison que l'étude précédente, ces valeurs d'énergies ont été considérées en fonction de la disponibilité des résultats dans la littérature pour comprendre les effets fins lors d'une collision élastique. L'ensemble des résultats obtenus sont représentés sur les trois figures (2.3), (2.4) et (2.5).

### ➤ Cas basses énergies

Dans cette partie nous cherchons à calculer les différentes contributions des sections efficaces différentielles élastiques pour les faibles valeurs d'énergies incidentes (50 eV, 60 eV et 80 eV). L'ensemble des résultats obtenus par ce calcul sont représentés dans la figure (2.3) suivante:

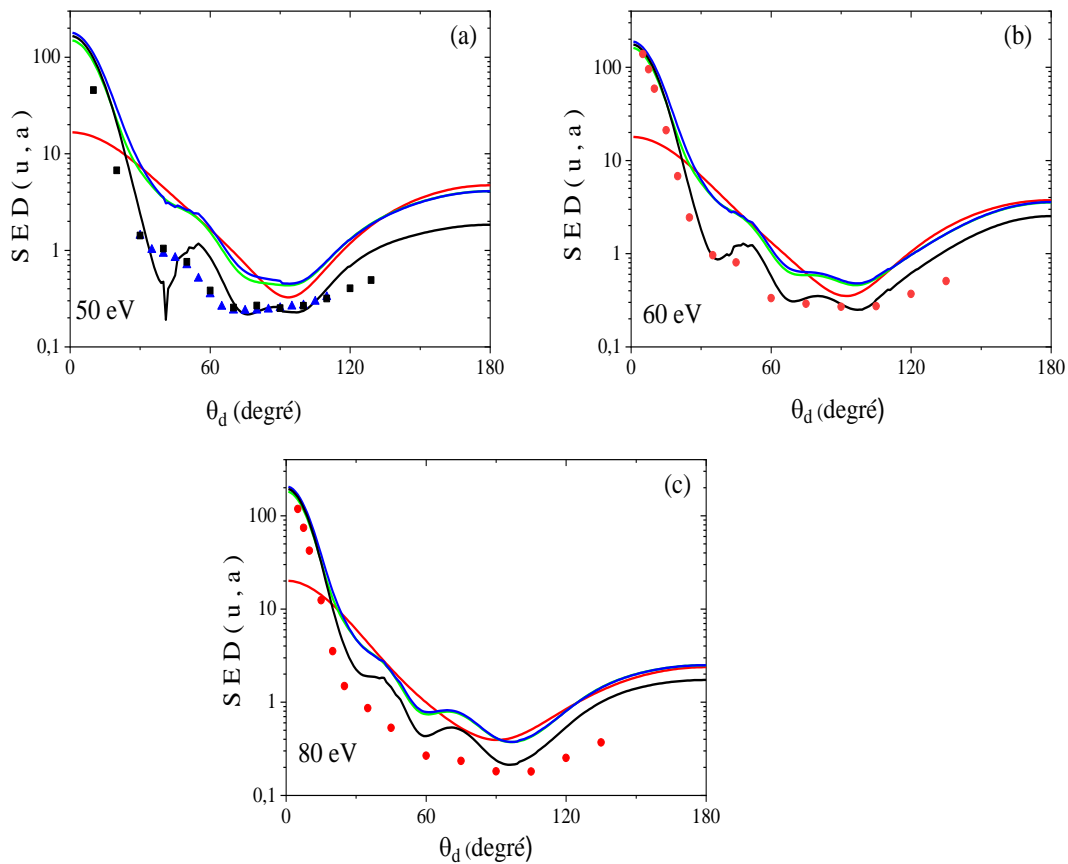


Figure 2.3: Variation des sections efficaces différentielles de la molécule uracile ( $U; C_4H_4O_2N_2$ ) en fonction de l'angle de diffusion  $\theta_d$  pour les énergies incidentes (50 eV, 60 eV et 80 eV). La ligne rouge continue, la ligne verte continue, la ligne bleue continue et ligne noire continue représentent la section efficace différentielle correspondante à  $I_S$ ,  $I_S + I_{SS}$ ,  $I_S + I_{SS} + I_L + I_{LS}$  et  $I_S + I_{SS} + I_L + I_{LS} + I_{SD}^{(1)} + I_{SD}^{(2)} + I_{DD}^{(0)}$  respectivement (voir équation(1.49)). Les prédictions théoriques et expérimentales disponibles tirées de la littérature sont rapportées à titre de comparaison par: Baek et al [18] (cercles pleins rouges), Palihawadana et al [43] (carrés pleins noirs) et Maljkovic et al [17] (triangle pleins bleus) pour la molécule pyrimidine.

La figure (2.3) représente l'évolution des différents termes des sections efficaces différentielles élastiques correspondantes aux faibles valeurs d'énergies incidentes en fonction de l'angle de diffusion.

D'après la figure (2.3.a), on constate, lorsqu'on introduit uniquement le terme statique  $I_S$  à courte portée (courbe rouge) l'amplitude de diffusion est importante dans la zone de diffusion  $\theta_d \lesssim 13^\circ$ , aussitôt elle diminue jusqu'à atteindre un minimum autour de  $\theta_d \approx 94^\circ$  et au-delà de cet angle augmente à nouveau. Ainsi, lorsqu'on rajoute la contribution inter-atomique  $I_{SS}$  (courbe verte) l'amplitude augmente et la profondeur du minimum vu précédemment diminue, puis, s'élargit et se décale vers le haut pour se situer autour de  $\theta_d \approx 85^\circ$ . L'effet de cette contribution devient négligeable autour de  $\theta_d \approx 27^\circ$ ,  $\theta_d \approx 55^\circ$ ,  $\theta_d \approx 82^\circ$  et  $\theta_d \approx 132^\circ$ . En tenant compte des deux autres contributions  $I_L$  et  $I_{LS}$  (courbe bleue) dues respectivement à la contribution du potentiel à longue portée et à l'interférences entre le potentiel statique et les potentiels d'échange, corrélation-polarisation, on remarque que l'amplitude augmente légèrement, et l'effet de cette contribution est négligeable aux voisinages de  $\theta_d \approx 35^\circ$ ,  $\theta_d \approx 58^\circ$ ,  $\theta_d \approx 62^\circ$ ,  $\theta_d \approx 85^\circ$  et  $\theta_d \approx 130^\circ$  devant la contribution de  $I_S$ . Par contre, le rajout des termes de diffusions multiples  $I_{SD}^{(1)}$ ,  $I_{SD}^{(2)}$  et  $I_{DD}^{(0)}$  (courbe noire), induit une diminution de l'amplitude suivant tout l'intervalle des angles de diffusion  $\theta_d$ , avec l'apparition de trois minimums qui sont situés aux voisinages de  $\theta_d \approx 40^\circ$  et  $\theta_d \approx 75^\circ$  et  $\theta_d \approx 96^\circ$ .

Pour l'énergie incidente  $E_i = 60$  eV (figure (2.3.b)), présente le même comportement que les courbes représentées dans la figure précédente (2.3.a) sauf que la contribution de la multiple diffusion  $I_{SD}^{(1)}$ ,  $I_{SD}^{(2)}$  et  $I_{DD}^{(0)}$  (courbe noire) induit une légère réduction de la profondeur des minimums et leurs amplitudes de diffusion.

Pour l'énergie incidente 80 eV (figure (2.3.c)), montre clairement que les contributions des différents termes  $I_{SS}$ ,  $I_L$  et  $I_{LS}$ ,  $I_{SD}^{(1)}$ ,  $I_{SD}^{(2)}$  et  $I_{DD}^{(0)}$  sont plus importantes que celle de  $I_S$  pour les angles de diffusion inférieure à  $15^\circ$ , tandis qu'au voisinage de  $\theta_d \approx 25^\circ$  leurs contributions sont négligeables devant la contribution de  $I_S$ . Les termes de la multiples diffusion  $I_{SD}^{(1)}$ ,  $I_{SD}^{(2)}$  et  $I_{DD}^{(0)}$  (courbe noire) présentent toujours leurs influences sur toute la gamme des angles de diffusion.

La comparaison de nos résultats obtenus pour la section efficace différentielle de la diffusion élastique d'électrons par la cible ( $C_4H_4N_2O_2$ ) pour les énergies incidentes (50 eV, 60 eV et 80 eV) avec les résultats de mesures expérimentales sur la molécule pyrimidine rapporté par Palihawadana et al [43], Beak et al [18] et Maljkovic et al [17] montre qu'il

existe un bon accord sur certaines régions de diffusion et cela est dû au fait que la forme géométrique des deux molécules est similaire.

### ➤ Cas d'énergies moyennes

Nous avons calculé dans cette partie les sections efficaces différentielles élastiques pour les valeurs d'énergies moyennes (100 eV, 200 eV et 400 eV). L'ensemble des résultats obtenus est représentés dans la figure (2.4) suivante:

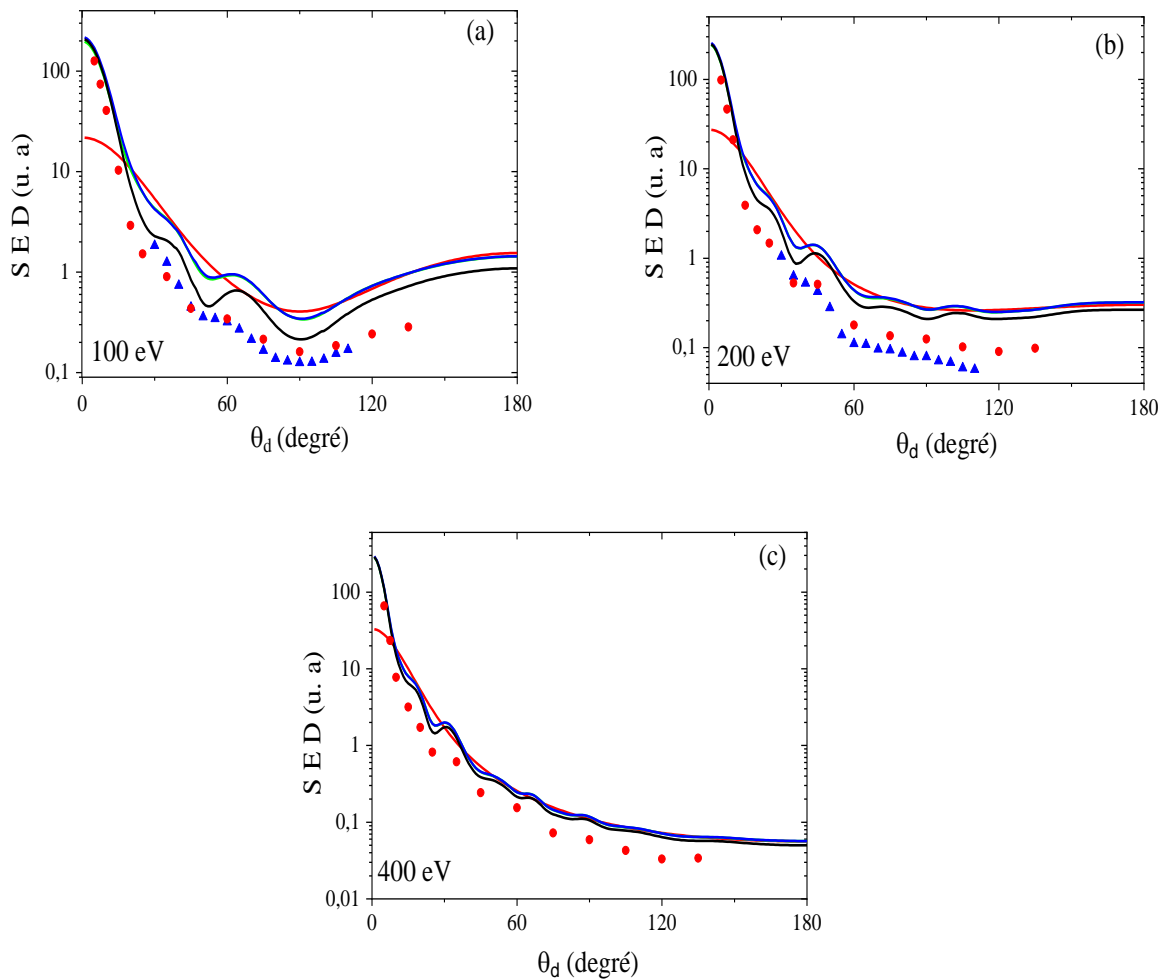


Figure 2.4: Variation des sections efficaces différentielles de la molécule uracile ( $U; C_4H_4O_2N_2$ ) en fonction de l'angle de diffusion  $\theta_d$  pour les énergies incidentes (100 eV, 200 eV et 400 eV). La ligne rouge continue, la ligne verte continue, la ligne bleue continue et ligne noire continue représentent la section efficace différentielle correspondante à  $I_S$ ,  $I_S + I_{SS}$ ,  $I_S + I_{SS} + I_L + I_{LS}$  et  $I_S + I_{SS} + I_L + I_{LS} + I_{SD}^{(1)} + I_{SD}^{(2)} + I_{DD}^{(0)}$  respectivement (voir équation (1.49)). Les prédictions théoriques et expérimentales disponibles tirées de la littérature sont rapportées à titre de comparaison par: Baek et al [18] (cercles pleins rouges) et Maljkovic et al [17] (triangle pleins bleus) pour la molécule pyrimidine.

La figure (2.4) représente le comportement des différentes contributions des sections efficaces différentielles élastiques correspondantes à des valeurs d'énergies moyennes en fonction de l'angle de diffusion.

La figure (2.4.a), montre que pour l'énergie incidente du projectile  $E_i = 100$  eV, le rapprochement devient important entre les différentes courbes obtenue. Nous constatons que l'amplitude du terme  $I_S$  (courbe rouge) est toujours significative dans la région d'angle de diffusion  $\theta_d \lesssim 13^\circ$ , aussitôt elle décroît pour atteindre un minimum autour de  $\theta_d \approx 91^\circ$  qui continue à s'élargir à chaque fois qu'on augmente l'énergie de l'électron incident. On constate que pour toutes les énergies incidentes, l'influence du terme d'interaction inter-atomique  $I_{SS}$  (courbe verte) est toujours significative pour des faibles angles de diffusion. Cependant cette interaction devient négligeable aux voisinages de  $\theta_d \approx 19^\circ$ ,  $\theta_d \approx 38^\circ$ ,  $\theta_d \approx 57^\circ$  et  $\theta_d \approx 80^\circ$  et dans l'intervalle d'angles comprises entre  $\theta_d \approx 103^\circ$  et  $\theta_d \approx 180^\circ$ . Tandis que l'influence de terme  $I_L$  et  $I_{LS}$  est négligeable sur toute la gamme angulaire et cela est dû au fait que les potentiels de corrélation-polarisation et d'échange n'ont aucun effet pour l'énergie 100 eV. Par contre les termes de la multiples diffusion  $I_{SD}^{(1)}$ ,  $I_{SD}^{(2)}$  et  $I_{DD}^{(0)}$  (courbe noire), présentent deux minimas autour de  $\theta_d \approx 51^\circ$  et  $\theta_d \approx 90^\circ$  avec deux profondeurs différentes et leurs effets deviennent négligeables pour  $\theta_d \approx 16^\circ$  et  $\theta_d \approx 65^\circ$  devant la contribution statique.

Pour les énergies incidentes du projectile 200 eV et 400 eV (figure (2.3.b) et figure (2.3.c)), on constate que l'amplitude du terme  $I_S$  (courbe rouge) augmente à faible angle de diffusion ( $\theta_d \lesssim 13^\circ$ ) et que le minimum qui a été observé à  $\theta_d \approx 91^\circ$  disparaît complètement pour des énergies  $E_i \gtrsim 100$  eV, alors que l'effet du terme inter-atomique  $I_{SS}$  (courbe verte) devient moindre en augmentant l'énergie de l'électron incidente. Cependant, l'effet inter-atomique joue un rôle important pour les angles de diffusion  $\theta_d \lesssim 13^\circ$ . La contribution des termes  $I_L$  et  $I_{LS}$  est négligeable sur toute la gamme angulaire de diffusion, cela est dû au fait que les potentiels de corrélation-polarisation et d'échange n'ont aucun effet pour les énergies incidentes supérieurs à 100 eV. De plus, on remarque que la contribution des termes de multiple diffusion  $I_{SD}^{(1)}$ ,  $I_{SD}^{(2)}$  et  $I_{DD}^{(0)}$  (courbe noire) est devenue très minime et la section efficace différentielle évolue de manière monotone avec des légères fluctuations.

Les sections efficaces différentielles calculées par notre modèle montrent un excellent accord avec celles mesurées par Baek al [18] pour des énergies  $E_i = 100$  eV,  $E_i = 200$  eV et  $E_i = 400$  eV dans la région de diffusion inférieure à  $10^\circ$ . Par ailleurs, il convient de noter que

la contribution des sections efficaces différentielles calculées théoriquement a la même allure que de celles mesurées par Maljkovic et al [17] et Baek al [18] avec de légères différences qui peuvent être observées près de l'amplitude des SED sont induites par la présence des atomes de l'oxygène O dans la molécule d'uracile.

### ➤ Cas d'énergies élevées

Nous avons calculé les sections efficaces différentielles élastiques pour les valeurs d'énergies incidentes élevées (600 eV, 800 eV et 1000 eV). L'ensemble des résultats obtenus par ce calcul sont représentés dans la figure (2.5) suivante:

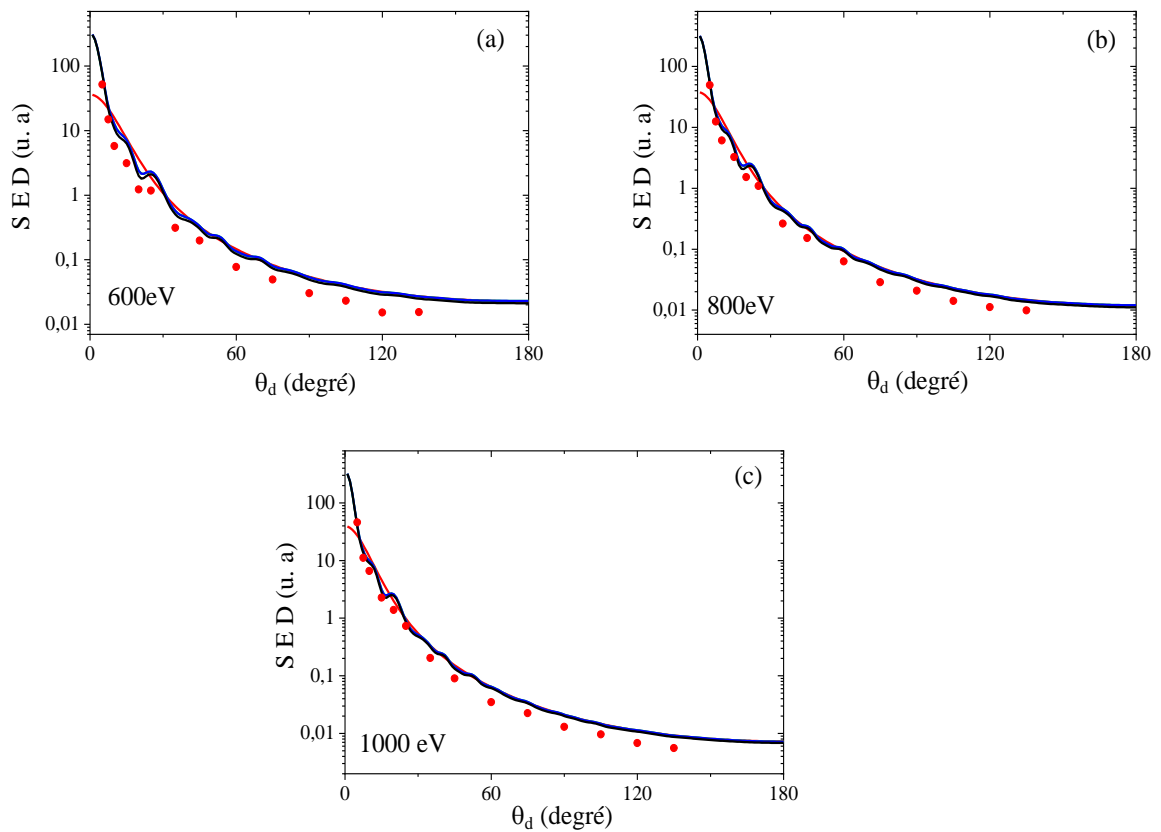


Figure 2.5: Variation des sections efficaces différentielles de la molécule uracile ( $U; C_4H_4O_2N_2$ ) en fonction de l'angle de diffusion  $\theta_d$  pour les énergies incidentes (600 eV, 800 eV et 1000 eV). La ligne rouge continue, la ligne verte continue et la ligne bleue continue et ligne noire continue représentent la section efficace différentielle correspondante à  $I_S$ ,  $I_S + I_{SS}$ ,  $I_S + I_{SS} + I_L + I_{LS}$  et  $I_S + I_{SS} + I_L + I_{LS} + I_{SD}^{(1)} + I_{SD}^{(2)} + I_{DD}^{(0)}$  respectivement (voir équation (1.49)). Les prédictions expérimentales disponibles tirées de la littérature sont rapportées à titre de comparaison par: Baek et al [18] (cercles pleins rouges) pour la molécule pyrimidine.

La figure (2.5) représente l'évolution des différents termes des sections efficaces différentielles élastique correspondante à des énergies incidentes élevées (600 eV, 800 eV et 1000 eV) en fonction de l'angle de diffusion.

D'après la figure (2.5.a), on remarque que les différentes contributions ont la même forme sur tout l'intervalle d'angle de diffusion  $\theta_d$  pour l'énergie incidente  $E_i = 600$  eV. D'abord, on constate que l'amplitude du terme statique  $I_S$  (courbe rouge) est importante pour les faibles angles. L'apparitions des termes  $I_{SS}$ ,  $I_L$ ,  $I_{LS}$ ,  $I_{SD}^{(1)}$ ,  $I_{SD}^{(2)}$  et  $I_{DD}^{(0)}$  (courbes verte, bleue et noire) respectivement induit à une augmentation dans l'amplitude pour les angles  $\theta_d \lesssim 13^\circ$ , au-delà de cet angle l'influence de ces termes diminue et deviennent négligeables devant la contribution de  $I_S$ .

Les différentes courbes représentées sur les figures (2.5.b) et (2.5.c), pour des énergies de l'électron incident  $E_i = 800$  eV et  $E_i = 1000$  eV suivent le même comportement que les courbes représentées dans la figure précédente (2.5.a) sauf que l'influence des différents termes diminue avec l'augmentation de ces énergies. Pour l'énergie incidente  $E_i = 1000$  eV l'effet de la multiple diffusion est négligeable sur toute la gamme d'angle de diffusion. Ainsi la contribution des termes  $I_L$ ,  $I_{LS}$  et la contribution inter-atomique  $I_{SS}$  sont négligeables dans la gamme angulaire de diffusion ( $\theta_d \gtrsim 13^\circ$ ) et cela est dû au fait que les potentiels de corrélation-polarisation et d'échange n'ont aucun effet pour l'énergie 1000 eV. Il est à remarquer que pour des énergies incidentes élevées l'effet du potentiel statique prédomine toujours.

Les sections efficaces obtenues sont comparées aux données expérimentales de Baek et al [18] (cercles rouges pleins) pour la molécule pyrimidine. Les SED montrent presque le même comportement par rapport à toutes les énergies d'électrons illustrées dans la figure (2.5), seules de légères différences pouvant être observées près de l'amplitude des SED sont induites par la présence des atomes de l'oxygène O dans l'uracile.

### 2.3.2 Sections efficaces intégrales élastiques

Les sections efficaces intégrales élastiques sont calculées numériquement en intégrant les sections efficaces différentielles sur tout l'espace de l'électron diffusé ( $\Omega$ ) et reportées sur la figure. (2.6), pour des énergies incidentes allant de 20 eV jusqu'à 100 keV. Pour valider notre modèle, nous avons comparé, nos résultats aux données théoriques et expérimentaux disponibles dans la littérature sur l'uracile et pour une molécule similaire à celle-ci

(pyrimidine). D'après la figure (2.6), on constate que l'amplitude de la section efficace intégrale est importante dans le domaine des énergies incidentes  $E_i \lesssim 100$  eV, puis décroît d'une manière monotone avec l'augmentation de l'énergie incidente du projectile. Ceci est dû au fait que les effets d'échange, de polarisation-corrélation et la multiple diffusion sont négligeables pour les énergies d'impact élevées.

Les présents résultats sont également comparés aux différentes mesures de sections efficaces totales de diffusion d'électrons rapportées pour la pyrimidine par Baek et al [18] dans la gamme d'énergie de 10 eV à 1000 eV (cercles pleins rouges), Fuss et al [23] dans la plage d'énergie incidente allant de 8 eV à 500 eV (triangles pleins verts). De plus nos résultats sont aussi comparés à différentes prédictions théoriques sur l'uracile donné par Mozejko et al [13] dans la gamme d'énergie allant de 50 eV à 4000 eV (points bleus) et Zywicka et al [44] de 50 eV à 3000 eV (tirets rouges). La comparaison de la section efficace intégrale obtenue avec les résultats expérimentaux sur la molécule d'uracile de Fuss et al [23] et Baek et al [18] montre un bon accord dans la gamme où ces derniers existent. De plus nos résultats présentent la même allure que la théorie de Mozejko et al [13] et Zywicka et al [44] avec une légère différence dans l'amplitude qu'est légèrement réduite, cela est dû au fait que ces derniers n'ont pas pris en considération les effets d'échanges et la multiples diffusions.

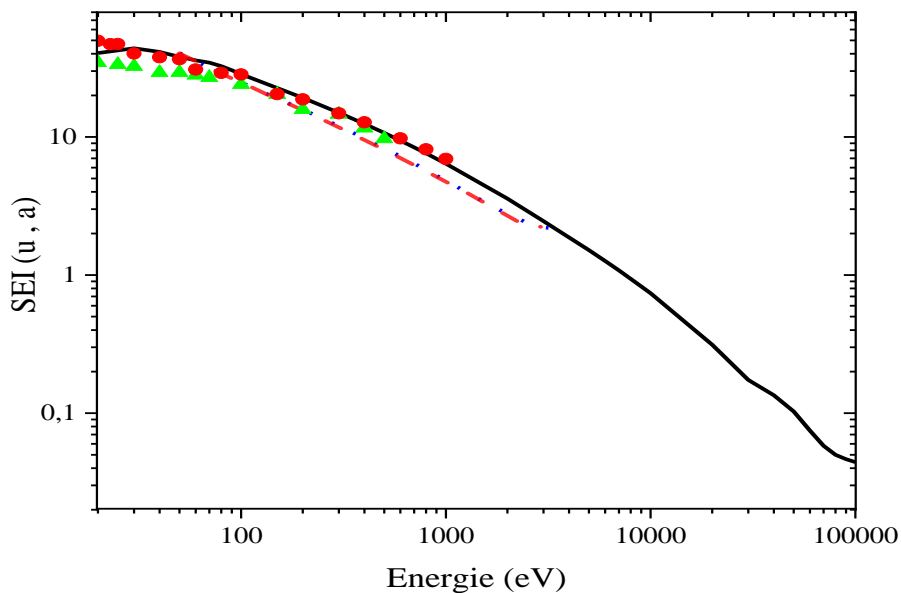


Figure 2.6: Variation de la section efficace intégrale de la molécule uracile ( $U, C_4H_4O_2N_2$ ) en fonction de l'énergie incidente (ligne noire continue). Les prédictions théoriques et expérimentales disponibles issues de la littérature sont rapportées à titre de comparaison par: Baek et al [18] (cercles pleins rouges) et Fuss et al [23] (triangles pleins verts) pour la pyrimidine, Mozejko et al [13] (ligne bleue pointillée) et Zywicka et al [44] (traits rouges) pour la molécule d'uracile.

## Conclusion générale

Le travail présenté dans le cadre de ce mémoire, est consacré à l'étude de la diffusion élastique d'électron par la molécule biologique uracile ( $U ; C_4H_4O_2N_2$ ) qui est une base azotée de l'ARN de nos cellules vivantes. L'objectif principal de notre travail, est de calculer les sections efficaces différentielles et intégrales avec et sans les effets de la multiple diffusion pour des différentes valeurs d'énergies incidentes.

Ce mémoire est présenté en deux chapitres tels que dans le premier, nous avons rappelé quelques notions théoriques sur la diffusion élastique dans lesquelles nous avons défini les deux méthodes de calcul des sections efficaces, à savoir la méthode des déphasages pour les faibles énergies incidentes et la méthode de Born pour des énergies élevées. Par la suite, nous avons donné les différents potentiels mis en jeu, en tenant compte des interactions qui existent entre l'électron incident et la cible moléculaire. Ainsi, nous avons donné la structure de l'ARN, puis la description de logiciel Gaussien qui permet de modéliser la molécule d'uracile et de calculer les coordonnées cartésiennes ainsi que la polarisabilité moyenne de la molécule biologique (uracile). Le deuxième chapitre est consacré à l'analyse des résultats obtenus par la programmation des sections efficaces élastiques de la molécule d'uracile par impact d'électrons, en introduisant les différents phénomènes physiques tels que: l'échange corrélation-polarisation, interaction inter-atomique et la multiple diffusion. D'une part, les sections efficaces différentielles élastiques ont été calculées en fonction d'angle de diffusion pour différentes valeurs d'énergies d'impacts.

Nous retenons que pour des énergies incidentes  $E_i \lesssim 100$  eV, la section efficace différentielle élastique due au potentiel statique admet un minimum de Ramsauer-Townsend au voisinage de  $\theta_d \approx 90^\circ$  puis disparaît complètement pour des énergies  $E_i \gtrsim 200$  eV. On a constaté aussi que l'influence de la contribution inter-atomique est significative sur toute la gamme des angles de diffusion pour l'énergie d'impact  $E_i \lesssim 100$  eV. Par contre pour d'énergies élevées, l'interaction entre les atomes de la molécule d'uracile devient négligeable pour les angles élevés sauf que pour des  $\theta_d \lesssim 10^\circ$ .

On a noté que l'effet des potentiels d'échange et de corrélation-polarisation est significatif pour des valeurs d'énergies incidentes  $E_i \lesssim 100$  eV, alors qu'ils deviennent négligeables sur toute la gamme angulaire pour les énergies  $E_i \gtrsim 200$  eV. En ce qui concerne l'effet de la multiple diffusion, il a été remarqué qu'elle présente une influence significative

aux faibles énergies incidentes. De plus, cette influence diminue progressivement avec l'augmentation de l'énergie jusqu'à devenir négligeable sur toute la gamme angulaire pour les énergies  $E_i \gtrsim 1000$  eV. Par contre, il a été remarqué que la section efficace intégrale diminue d'une façon monotone en fonction de l'énergie d'impact.

Nous avons comparé les résultats obtenus avec des données théoriques et des mesures expérimentales qui existent dans la littérature, on a constaté une légère différence avec nos résultats et cela est dû à la négligence de quelque contribution. Quant aux sections efficaces intégrales pour des énergies d'impacts allant de 20 eV à 100 keV un bon accord avec les mesures expérimentales a été observé.

Nous espérons avoir contribué par ce travail à ramener un plus à l'interaction d'une particule chargée avec la matière vivante, par ailleurs il ouvre plusieurs voies pour l'étude des diffusions élastiques et le calcul des sections efficaces par impact d'autres particules incidentes tel que les protons et positrons.

## Bibliographie

- [1] G P Karwasz, A Zecca, R S Brusa et D Pliszka. *J. Alloys Compd*, **382**: 244. 2004.
- [2] C Hugenschmidt, U Holzwarth, M Jansn, S Kohn et K Maier. *J. Non-Cryst. Solids*, **217**: 72. 1997.
- [3] W N Johnson, F R Harnden et R C Haymes. *Astro phys J*. **172**: L1. 1972.
- [4] N Guessoum, R Ramaty et R Lingenfelter. *Astro phys. J*. **378**: 170. 1991.
- [5] C Peroval, F Debeaufort, A M Seuvre, B Chevet, D Despre et A Voilly. *J Agri et Food Chem*, **51**: 3120. 2003.
- [6] C Desrosiers, V Moskvina, A F Bielajew et L Papiez. *Phys Med Bio*, **45**: 1781. 2000.
- [7] J F Ward. *Rad res*, **104**: 103. 1985.
- [8] S Mokrani, H Aouchiche et C Champion. *Rad Phys et Chem*, **172**: 108735. 2020.
- [9] H Aouchiche, S Mokrani, M A Quinto et C Champion. *Int J Mass Spect*, **379**: 65. 2015.
- [10] H Nikjoo et D T Goodhead. *Phys Med Biol*, **36**: 229. 1991.
- [11] G Baldacchino, V Wasselin-Trupin, S Bouffard, E Balanzat, M Gardés-Albert, D Jore, S Deycard et B Hickel. *Can. J. Phys Phar*, **79**: 180. 2001.
- [12] C Winstead et V Mckoy. *J Chem Phys*, **125**: 174304. 2006.
- [13] P Mozejko et L Sanche. *Rad Env Bio phys*, **42**: 201. 2003.
- [14] G M Moreira, R Fda Costa et M H F Bettiga. *Phys Rev A*, **103**: 012804. 2021.
- [15] J Franz, F A.Gianturco et I Baccarelli. *Eur. Phys. J. D*, **68**: 183. 2014.
- [16] G A Gallup et I IFabrikant. *Phys Rev A*, **83**: 012706. 2011.
- [17] J B Maljkovic, A R Milosavljevic, F Blanco, D Sevic, G Garcia et P B Marinkovic. *Phys Rev A*, **79**: 052706. 2009.
- [18] W Y Baek, M U Bug et H Rabus. *Phys Rev A*, **89**: 062716. 2014.
- [19] W Y Baek, A Arndt, M U Bug, H Rabus et M Wang. *Phys Rev A*, **88**: 032702. 2013.
- [20] M Fuss, A Muñoz, J C Oller, F Blanco, D Almeida, P Limão-Vieira, T P D Do, M J Brunger et G García. *Phys Rev A*, **80**: 052709. 2009.
- [21] M C Fuss, A G Sanz, F Blanco, J C Oller, P Limao-Vieira, M J Brunger et G. Garcia. *J Phys: Conf Series*, **488**: 012048. 2014.
- [22] M C Fuss, L Ellis-Gibbins, D B Jones, M J Brunger, F Blanco, A Munoz, P Limao-Vieira et G Garcia. *J Appl Phys*, **117**: 214701. 2015.
- [23] M C Fuss, A G Sanz, F Blanco, J C Oller, P L-Vieira, M J. Brunger et G Garcia *Phys Rev A*, **88**: 042702. 2013.

- [24] J Tabet, S Eden, S Feil, H Abdoul-Carime, B Farizon, M Farizon, S Ouaskit et T D Märk, *Phys Rev A*, **82**: 022703. 2010.
- [25] A Messiah. *Mécanique quantique Tome 1*, Ed Dunod Paris. 1972.
- [26] C C Tanoudji, B Diu et F Laloe. *Mécanique quantique*, Ed Dunod Paris. 1973.
- [27] M C Fuss, A G Sanz, F Blanco, P Limao-Vieira, M J Brunger et G Garcia. *EurPhys J D*, **68**: 161. 2014.
- [28] A Jain. *J. Chem. Phys*, **81**: 724. 1984.
- [29] J C Slater. *Phys Rev*, **36**: 57.1930.
- [30] D d Reid et J M Wadehra. *Phys Rev A*, **50**: 4860. 1994.
- [31] H Aouchiche et F Medegga. *Russ J Phys Chem A*, **93**: 116. 2019.
- [32] F P Bardela, A J da Silva, V A S da Mata, M G P Homem, I Iga, R T Sugohara et M M Fujimoto. *J Phys B: Atom, Mol Opt Phys*, **54**: 075203. 2021.
- [33] S Mokrani, H Aouchiche et C Champion. *Ind J Phys*, **92**: 7. 2018.
- [34] C Champion, M A Quinto, M U. Bug, W Y. Baek et P F Weck. *Eur Phys. J. D*, **68**: 205. 2014.
- [35] J B Furness et I E McCarty. *J Phys B: Atom Mol Phys*, **6**: 2280. 1973.
- [36] M H Mittleman et K M Watson. *Ann Phys*, **10**: 268. 1960.
- [37] F Salvat. *Phys Rev A*, **68**: 012708. 2003.
- [38] H Aouchiche, C Champion et D Oubaziz. *Rad Phys Chem*, **77**: 107. 2008.
- [39] N T Padial et D W Norcross. *Phys Rev A*, **29**: 1742. 1984.
- [40] S Hayashi et K Kuchitsu. *J Phys Soc Jpn*, **41**: 5. 1976.
- [41] W J Hehre, R F Stewart et J A Pople. *J Chem Phys*, 2657. 1969.
- [42] J S Binkley, J A Pople et W J Hehre. *J Am Chem Soc*, **102**: 939. 1980.
- [43] P Palihawadana, J Sullivan, M Brunger, C Winstead, V McKoy, G Garcia, F Blanco et Buckman. *Phys Rev A*, **84**: 062702. 2011.
- [44] B Zywicka et P Mozejko. *Eur Phys. J. D*, **66**: 54. 2012.

**Abstract:**

Differential and integral cross sections for elastic collisions between electrons and ribonucleic acid (RNA) components are calculated using the independent atom method with the different interaction potentials: static, exchange, correlation and polarization. Differential cross sections with and without multiple scattering are presented for uracil in the 1eV–1keV electron energy range. The results obtained are compared and discussed with the results available for similar molecules of uracil such as pyrimidine.

**Key words:**

Differential and integral cross sections, electron elastic scattering, pyrimidine, uracil, RNA, DNA, interaction potentials....

**Résumé:**

Les sections efficaces différentielles et intégrales pour les collisions élastiques entre les électrons et les composants de l'acide ribonucléique (ARN) sont calculées en utilisant la méthode des atomes indépendants avec les différents potentiels d'interaction: statique, échange, corrélation et polarisation. Les sections efficaces différentielles avec et sans effet de diffusion multiple sont présentées pour l'uracile dans la gamme d'énergie électronique de 1eV à 1keV. Les résultats obtenus sont comparés et discutés avec les résultats disponibles pour des molécules similaires d'uracile telles que la pyrimidine.

**Mots clés:**

Sections efficaces différentielles et intégrales, diffusion élastique d'électrons, ADN, ARN, potentiel d'interaction, uracile, pyrimidine ....