

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITÉ MOULOUD MAMMARI DE TIZI-OUZOU

FACULTÉ DES SCIENCES

DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE

LABORATOIRE DE MÉCANIQUE, STRUCTURE ET ÉNERGÉTIQUE



MÉMOIRE DE MASTER

Filière : Physique

Spécialité : Nanophysique

Présenté par :

SI TAYEB Belkacem

Thème

Diffusion élastique des électrons par une molécule-base de l'ADN

Devant le jury d'examen composé de :

ZIANE	Abdelhamid	Professeur	U.M.M.T.O.	Président
AOUCHICHE	Hocine	Professeur	U.M.M.T.O.	Examineur
MOKRANI	Saida	Maître de conférence	U.M.M.T.O.	Encadreur
HAMMOUM	Karima	Maître de conférence	U.M.M.T.O.	Co-Encadreur

Soutenue publiquement le : 15/07/2019

Remerciements

Ce travail a été effectué au sein du Laboratoire de Mécanique, Structure et Énergétique (LMSE) de l'université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, sous la direction de Madame MOKRANI Saida, maître de conférences B, que je tiens à remercier vivement pour sa disponibilité, son soutien et sa patience le long de tout mon stage de master. Je remercie également ma Co-promotrice, Madame HAMMOUM Karima, maître de conférences A, pour sa disponibilité et ses conseils qui m'ont beaucoup aidé pour réaliser ce mémoire.

Je tiens à exprimer toute ma gratitude aux membres du jury ; le professeur ZIANE Abdelhamid de m'avoir fait l'honneur de présider ce jury, ainsi que le professeur AOUCHICHE Hocine d'avoir accepté d'examiner et de juger ce travail.

Mes remerciements vont aussi au directeur et aux membres d'équipe de recherche de ce laboratoire de m'avoir bien accueilli et m'avoir offert les conditions nécessaires au bon déroulement de ce stage.

J'adresse aussi mes vifs remerciements à tous les enseignants du département de physique pour le savoir transmis le long de mon cursus universitaire.

Je n'oublie pas de remercier toutes les personnes qui m'ont aidé pour réaliser ce travail , ainsi que mes camarades de promotion pour les bons moments qu'on avait passé ensemble.

Enfin, je tiens à remercier grandement mes parents, ma grand-mère et mes sœurs pour le soutien qui m'ont apporté durant toute ces années d'étude.

Dédicace

Je dédie ce modeste travail à :

Mes très chers parents et grand-mère pour tout leurs soutient que dieu les protège.

A mes chères sœurs Nawal, Kahina et son époux Si Brahim et mes neveux Islam, Ilyan. Razika et son époux Mohamed et mes neveux Samy, Sofiane. Souhila et son époux Idir et mon neveu Aksil.

Toute ma famille, mes amis et tout ceux qui ont contribué à la réalisation de ce travail.

Résumé

L'interaction entre des particules chargées et des tissus biologiques est une notion très présente en radiothérapie. Dans ce travail, nous nous proposons de calculer numériquement les sections efficaces différentielles et intégrales de la diffusion élastique d'électrons à faibles et à hautes énergies par des biomolécules (type base azotée) constituant l'ADN et l'ARN, en particulier la pyrimidine et l'adénine. 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 en considérant les différents potentiels à courte et à grande distance. Les sections efficaces différentielles et intégrales, obtenues dans la plage d'énergie incidente $10eV - 5MeV$, sont discutées et comparées aux résultats disponibles dans la littérature. De façon générale, un bon accord est obtenu.

Mots clés : Sections efficaces différentielles et intégrales, diffusion élastique d'électrons, pyrimidine, adénine.

Abstract

The interaction between charged particles and biological tissue is a daily concept in radiotherapy. In this work, we proposed numerical calculation of the differential and integrated cross sections of electron elastic scattering at low and high energies by biomolecules (nitrogen base type) constituting the DNA and RNA, in particular the pyrimidine and adenine. The problem treatment is performed within a quantum mechanical framework combining the two formalisms : the partial waves and Born approximation. The differential and integral cross sections obtained in the investigated energy range $10eV - 5MeV$ are discussed and compared to the available results in the literature. Generally, a good agreement is observed.

Key words : Differential and integral cross sections, electron elastic scattering, pyrimidine, adenine.

Table des matières

Introduction générale	1
1 Rappels théoriques sur la diffusion élastique	3
1.1 Introduction	3
1.2 Méthodes de calcul des sections efficaces	3
1.2.1 Formalisme des ondes partielles (Méthode de déphasage)	4
1.2.2 Approximation de Born	7
1.3 Densité de charge électronique	8
1.4 Le potentiel optique	9
1.4.1 Le potentiel statique	10
1.4.2 Le potentiel d'échange	10
1.4.3 Le potentiel de corrélation - polarisation	10
1.5 Notions sur la section efficace	12
1.5.1 Section efficace différentielle	12
1.5.2 Section efficace intégrée	14
1.6 Description des cibles biomoléculaires	14
1.6.1 Pyrimidine	14
1.6.2 Adénine	14
2 Résultats et discussions	16
2.1 Introduction	16
2.2 Etude de la diffusion par la pyrimidine	16
2.2.1 Densité électronique	16
2.2.2 Sections efficaces différentielles (SED)	17
2.2.3 Section efficace intégrale de la molécule pyrimidine	21
2.3 Etude de la diffusion par l'adénine	22
2.3.1 Densité électronique	22
2.3.2 Sections efficaces différentielles (SED)	23
2.3.3 Section efficace intégrale de la molécule d'adénine	27
Conclusion générale	28
Bibliographie	30

Introduction générale

L'interaction rayonnement-matière est impliquée dans des domaines de recherche très variés tels que la physique des plasmas [1], l'astrophysique [2], l'industrie alimentaire [3] ou encore la radiobiologie [4, 5]. En effet, lorsqu'un rayonnement pénètre dans la matière, il modifie certaines propriétés du milieu irradié. Dans le cas spécifique d'une matière biologique, cellule vivante, cette altération, lorsqu'elle n'est pas corrigée, peut entraîner à long terme l'apparition d'aberrations chromosomiques pouvant entraîner des mutations, cancers ou la mort cellulaire. Paradoxalement, L'irradiation a pour but de détruire les cellules cancéreuses tout en préservant le mieux possible les tissus sains et les organes avoisinants : c'est le cas de la radiothérapie. Ainsi, Il est donc important de pouvoir suivre le trajet de la particule incidente dans la matière biologique, afin de comprendre en détails l'action des rayonnements ionisants sur le milieu biologique, tant sur le plan macroscopique que moléculaire, afin de pouvoir mieux prédire et contrôler ses effets.

Dans le cadre de ce travail, nous sommes allé plus loin en modélisant le milieu biologique, non pas par la molécule d'eau, mais par des bases azotées telles que la pyrimidine et l'adénine. Notre choix est porté sur ces deux molécules (cibles) pour leur abondance dans le corps humain et leur agencement à plusieurs autres molécules différentes. De plus, ces deux molécules cibles (pyrimidine et adénine) sont les constituants les plus importants de l'ADN et de l'ARN sous forme de nucléotides dans la cellule vivante. D'ailleurs, de nombreux travaux théoriques et expérimentaux portant sur les collisions élastiques entre les particules chargées et les deux biomolécules (la pyrimidine et l'adénine) ont été reportés. Notamment, Sanche et collaborateurs [6] ont montré l'importance des électrons à basse énergie pour la rupture de brin d'ADN. Mentionnons aussi les travaux de Blanco et García [7, 8] basés sur le calcul des sections efficaces élastiques et inélastiques pour des énergies comprises entre $10eV$ et $10keV$ et ceux rapportés par Mozejko et Sanche [9] en utilisant le modèle des atomes indépendants (IAM) incluant un potentiel statique et de polarisation pour des énergies incidentes allant de $50eV$ à $4keV$. À faible énergie de diffusion, nous avons également le modèle qui inclut en plus du potentiel statique, les effets d'échange et de corrélation-polarisation développé par Tozani et Greene sur des bases d'ADN et d'ARN [10]. D'autre part plusieurs chercheurs ont étudié la diffusion par les constituants d'ADN principalement sur le tétrahydrofurane, qui est couramment utilisé comme substitut du désoxyribose composant l'ADN des cellules de la colonne vertébrale [11, 12, 13]. De plus, la méthode de R-matrix a été développée par Dora et *al.*

[14] pour évaluer les sections efficaces élastiques et inélastiques sur les bases cytosine, thymine et pyrimidine. En outre, Ferraz et *al.* [15] ont combiné le potentiel d'absorption pondéré quasi-libre (SQFS) avec la contribution de la combinaison statique-échange-corrélation-polarisation et ont déterminé les sections efficaces différentielles et intégrales de la diffusion élastique, ainsi que les sections efficaces d'absorption (inélastique) et totale pour l'interaction électron-pyrimidine pour des énergies d'impact allant de $0,2eV$ à $500eV$. Maljkovic et *al.* [16] ont mesuré les sections efficaces différentielles de la pyrimidine pour des angles de diffusion allant 30° à 110° dans le domaine des énergies incidentes entre $30eV$ et $300eV$. De plus, Baek et *al.* [17, 18] ont proposé le modèle modifié d'atomes indépendants (MIAM) pour prendre en compte la diffusion multiple d'électrons à l'intérieur de la molécule et la diffusion due aux potentiels à longue distance. Récemment, Fuss et *al.* [19] ont réalisé des simulations sur des particules chargées pour le calcul des dommages induits par des rayonnements sur les molécules de pyrimidine et d'eau.

Étant donné le succès du modèle développé par Aouchiche et Champion [20, 21], nous proposons de l'appliquer dans ce travail aux molécules biologiques : pyrimidine et adénine. De plus dans ce travail nous nous intéressons à des électrons de basses et hautes énergies, puisque ce paramètre influe beaucoup sur le phénomène de collisions. En effet, plus l'énergie de l'électron est faible, plus la particule incidente passe plus de temps aux voisinages de la molécule cible. Ainsi, des effets fins tels que la diffusion multiple de l'électron sur la molécule, peuvent avoir une grande importance dans les interactions. Les résultats de ces interactions sont rapportés dans notre travail sous forme de section efficace différentielle ou intégrale.

Ce rapport de stage est constitué de deux chapitres. Après avoir donné un rappel bibliographique sur la diffusion par impact des particules chargées et l'intérêt des deux cibles (pyrimidine et adénine) dans l'introduction générale, nous détaillons ce rapport de stage par deux chapitres.

Dans le premier, nous détaillerons l'aspect théorique de cette étude en présentant le formalisme quantique utilisé ainsi que les contributions à la section efficace différentielle des différents potentiels d'interactions. Le deuxième chapitre est consacré aux résultats numériques obtenus à savoir les sections efficaces différentielles, pour différentes énergies incidentes, en fonction de l'angle de diffusion afin de montrer les différents phénomènes physiques (échange, corrélation-polarisation, interaction inter-atomique, diffusion multiple, ...) intervenants dans les processus de collisions. Enfin, nous terminons par une conclusion où seront consignés les points les plus importants de notre travail.

Chapitre 1

Rappels théoriques sur la diffusion élastique

1.1 Introduction

Ce chapitre est consacré aux notions théoriques concernant les phénomènes de collisions entre des particules chargées et la matière biologique. Ces collisions donnent lieu à des réactions diverses. Parmi toute les réactions possibles et dans certaines conditions, on distingue la diffusion du projectile, qu'on peut classer en deux catégories : la diffusion inélastique et la diffusion élastique. Dans notre cas, on s'intéresse qu'à la diffusion élastique d'électrons par une cible biomoléculaire. En effet, cette étude s'exprime, assez souvent, par des quantités physiques appelées sections efficaces de diffusion élastique. L'objectif d'une telle étude est de préciser les rôles des potentiels d'interaction entre les différentes particules composant le système en tenant compte des interactions entre les électrons projectiles et les différentes charges des cibles biomoléculaires et cela en considérant une contribution principale, dite du potentiel statique. Ce dernier est calculé numériquement dans ce travail à travers des fonctions d'onde atomiques. Deux autres contributions fines dues aux effets de corrélation-polarisation et d'échange sont ajoutées au potentiel principal.

1.2 Méthodes de calcul des sections efficaces

Pour le calcul des sections efficaces, on peut utiliser deux méthodes différentes selon l'énergie de la particule incidente. Dans le cas d'une énergie incidente élevée, la particule cible n'a subit qu'une simple perturbation par le faisceau d'électrons incident, et dans ce cas la section efficace est calculée à l'aide de l'approximation de Born. Alors que pour des particules incidentes de basses énergies, cette approximation n'est plus valable et les sections efficaces sont ainsi calculées par une méthode dite du déphasage qui utilise un développement en ondes partielles.

1.2.1 Formalisme des ondes partielles (Méthode de déphasage)

Pour le calcul de la section efficace, il faut déterminer la solution de l'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques qui est définie comme suit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\vec{L}^2}{2m_e r^2} + V(r) \right] \Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = E \Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) \quad (1.1)$$

où \vec{L} vecteur du moment cinétique orbital, l est le nombre quantique orbital associé à \vec{L} et m est le nombre quantique associé à la projection de \vec{L} . Nous séparons la variable radiale et les variables angulaires, la fonction d'onde $\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$ s'écrit :

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (1.2)$$

où $Y_l^m(\theta, \varphi)$ sont les harmoniques sphériques et $R_{n,l}(r)$ est la fonction radiale, solution radiale de l'équation de Schrödinger :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E \right] R_{n,l}(r) = 0 \quad (1.3)$$

En faisant un changement de variables adéquat : $\chi_l(r) = r R_{n,l}(r)$, $E = \frac{\hbar^2}{2m_e} k^2$ et $V(r) = \frac{\hbar^2}{2m_e} U(r)$; puis on remplace $\chi_l(r)$, E et $V(r)$ dans l'équation (1.3), cette dernière devient :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 - U(r) \right] \frac{\chi_l(r)}{r} = 0 \quad (1.4)$$

Selon la forme du potentiel $U(r)$, la résolution de l'équation (1.4) est très compliquée. On fait ainsi appel à une méthode de calcul en émettant l'hypothèse suivante. L'onde associée à une particule libre a la même forme que l'onde décrivant le comportement d'une particule traversant une zone de potentiel sauf que ce dernier provoque un retard pour l'onde et se traduit ainsi par un déphasage d'où l'appellation de méthode des déphasages. On considère dans un premier temps le cas d'une particule libre ($U(r) = 0$).

1.2.1.1 En absence du potentiel (particule libre)

Pour ce cas, le potentiel est nul et donc l'équation (1.4) devient :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] R_{n,l}^{(0)}(r) = 0 \quad (1.5)$$

où $R_{n,l}^{(0)}(r)$ est la partie radiale de la fonction $\Psi_{n,l,m}^{(0)}(r, \theta, \varphi)$ en absence du potentiel, sa solution s'écrit :

$$R_{n,l}^{(0)}(r) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} j_l(kr) \quad (1.6)$$

avec $j_l(kr)$ est la fonction de Bessel qui a une forme asymptotique définie pour r grand par :

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

En utilisant la notation complexe de la fonction sinus, l'équation précédente s'écrit :

$$j_l(kr)_{r \rightarrow \infty} \sim \sum_{l=0}^{\infty} -\frac{1}{kr} \frac{(e^{-ikr} e^{i\frac{l\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-i\frac{l\pi}{2}})}{2i} \quad (1.8)$$

En injectant cette expression dans l'équation (1.2) et en tenant compte de l'équation (1.6), on obtient :

$$\Psi_{n,l,m}^{(0)}(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} -\sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} \frac{1}{kr} \frac{(e^{-ikr} e^{i\frac{l\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-i\frac{l\pi}{2}})}{2i} Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (1.9)$$

A l'infini, $\Psi_{n,l,m}^{(0)}(r, \theta, \varphi)$ est une superposition d'une onde entrante $\frac{e^{-ikr}}{r}$ et d'une onde sortante $\frac{e^{ikr}}{r}$ dont les amplitudes présente une différence de phase égale à $l\pi$.

1.2.1.2 En présence du potentiel d'interaction :

Quand r est grand ($r \rightarrow \infty$), le terme $\frac{l(l+1)}{r^2}$ tend vers zéro et le potentiel $V(r)$ étant à portée finie devient nul aussi. L'équation (1.4) devient :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right] R_{n,l}(r) = 0 \quad (1.10)$$

où la fonction radiale $R_{n,l}(r)$ a pour forme asymptotique :

$$R_{n,l}(r) = \frac{\chi_{n,l}(r)}{r} \sim \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \quad (1.11)$$

où δ_l est le déphasage de l'onde partielle dépendant de l'énergie de la particule incidente. En remplaçant l'équation (1.11) dans l'équation (1.2) on aura :

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

En tenant compte des transformations complexes de $\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right)$, la fonction d'onde de diffusion devient :

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{kr} \frac{(e^{ikr} e^{-i\frac{l\pi}{2}} e^{i\delta_l} - e^{-ikr} e^{i\frac{l\pi}{2}} e^{-i\delta_l})}{2i} Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (1.13)$$

L'équation précédente résulte également de la superposition d'une onde entrante et une onde sortante. Pour préciser la comparaison entre ondes partielles et ondes sphériques libres, on peut modifier l'onde entrante de l'équation précédente de façon qu'elle soit identique à celle de l'équation (1.9); on définit pour cela une nouvelle onde partielle en multipliant $\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$ par $e^{i\delta_l}$. La fonction d'onde de diffusion devient donc :

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} -\frac{1}{kr} \frac{(e^{-ikr} e^{i\frac{l\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-i\frac{l\pi}{2}} e^{2i\delta_l})}{2i} Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (1.14)$$

L'onde sortante a accumulé un déphasage $2\delta_l$ par rapport à l'onde sortante libre que l'on aurait obtenue si le potentiel $V(r)$ avait été identiquement nul. Sachant que le faisceau incident est défini par l'axe (Oz), la dépendance en φ disparaît ($m = 0$) puisque $V(r)$ a une symétrie sphérique. Ce qui permet de remplacer $Y_l^m(\theta, \varphi)$ par le polynôme de Legendre, et pour faire apparaître le développement asymptotique de l'onde plane e^{ikz} en ondes sphériques libre qui s'écrit sous forme :

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(kr) Y_l^0(\theta) \quad (1.15)$$

Nous écrivons le facteur $e^{2i\delta_l}$ comme suit :

$$e^{2i\delta_l} = 1 + 2ie^{i\delta_l} \sin\delta_l \quad (1.16)$$

En multipliant les deux membres de l'équation (1.14) par $\sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)}$, elle devient :

$$\tilde{\psi}_{n,l,0}(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} -a_l \left[\frac{(e^{-ikr} e^{i\frac{l\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-i\frac{l\pi}{2}})}{2ikr} - \frac{e^{ikr}}{r} \frac{1}{k} e^{-i\frac{l\pi}{2}} e^{i\delta_l} \sin(\delta_l) \right] \quad (1.17)$$

avec :

$$a_l = i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_l^0(\theta) \quad (1.18)$$

On reconnaît que le premier terme du second membre n'est que le développement asymptotique de l'onde plane e^{ikz} , l'équation précédente peut s'écrire alors comme suit :

$$\tilde{\psi}_{n,l,0}(r, \theta) = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (1.19)$$

Par identification avec l'équation (1.17), on déduit l'expression de l'amplitude de diffusion $f(\theta)$:

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_l \sqrt{4\pi(2l+1)} e^{i\delta_l} \sin(\delta_l) Y_l^0(\theta) \quad (1.20)$$

La section efficace est le carré de l'amplitude de diffusion, on a alors :

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \left| \frac{1}{k} \sum_l \sqrt{4\pi(2l+1)} e^{i\delta_l} \sin(\delta_l) Y_l^0(\theta) \right|^2 \quad (1.21)$$

1.2.2 Approximation de Born

Lors de cette approximation, on ne tient compte que de l'onde incidente et des ondes diffusées par une seule interaction entre le projectile et la cible moléculaire dans la description de l'onde totale de diffusion. On considère l'équation de Schrödinger sous la forme :

$$(\Delta + k^2 - U(\vec{r})) \Psi_k(\vec{r}) = 0 \quad (1.22)$$

On a alors toute fonction d'onde $\Psi_k(\vec{r})$ qui vérifie l'équation de Schrödinger décrite ci-dessus est une onde stationnaire de diffusion qui peut se mettre sous la forme :

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

avec $G(\vec{r} - \vec{r}')$ est la fonction de Green qui a une forme asymptotique, pour r tend vers l'infini, définie par :

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

où \vec{k}_d est un vecteur d'onde de diffusion.

Sachant que :

$$\Psi_0(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \vec{r}} \quad (1.25)$$

La fonction d'onde stationnaire de diffusion s'écrit :

$$\Psi_k^{diff}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \vec{r}} + \int d^3\vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \Psi_k^{diff}(\vec{r}') \quad (1.26)$$

En faisant un changement de variable : $\vec{r}' \rightarrow \vec{r}''$ et $\vec{r}'' \rightarrow \vec{r}'''$, on a :

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

En injectant cette expression dans celle de $\Psi_k^{diff}(\vec{r})$, on obtient :

$$\begin{aligned} \Psi_k^{diff}(\vec{r}) &= e^{i\vec{k} \vec{r}} + \int d^3\vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') e^{i\vec{k} \vec{r}'} + \int d^3\vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \\ &\quad \times \int d^3\vec{r}'' G(\vec{r}' - \vec{r}'') U(\vec{r}'') \Psi_k^{diff}(\vec{r}'') \end{aligned} \quad (1.28)$$

Si le potentiel intervenant est faible, le développement du dernier terme du second membre est de plus en plus faible. Ce terme inconnu devient alors négligeable. En remplaçant l'expression asymptotique de $G(\vec{r} - \vec{r}')$, on obtient l'expression de $\Psi_k^{diff}(\vec{r})$ comme suit :

$$\Psi_k^{diff}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r} \int e^{-i\vec{k}_d\vec{r}'} U(\vec{r}') e^{i\vec{k}\vec{r}'} d^3\vec{r}' \quad (1.29)$$

En identifiant l'expression précédente à celle donnée par (1.19), on obtient l'expression de l'amplitude de diffusion $f(\theta)$:

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\vec{K}\vec{r}'} U(\vec{r}') d^3\vec{r}' \quad (1.30)$$

L'intégrale de l'équation précédente est calculable dès que l'on connaît la forme analytique du potentiel, et est essentiellement l'élément de matrice du potentiel entre les ondes incidentes et diffusées. À un facteur près, c'est la transformé de Fourier du potentiel pour le vecteur d'onde $\vec{K} = \vec{k}_d - \vec{k}$ qui n'est autre que le transfert de moment conjugué lors de la collision. L'amplitude de diffusion $f(\theta)$ se simplifie pour un potentiel central puisque il est possible d'effectuer les intégrations sur les angles θ et φ . L'expression précédente s'écrit :

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int_{R^3} e^{-i\vec{K}\vec{r}'} U(\vec{r}') r'^2 dr' \sin(\theta) d\theta d\varphi \quad (1.31)$$

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 θ , le moment de transfert est donc donné par $K = 2k \sin(\frac{\theta}{2})$, d'où l'amplitude de diffusion de Born :

$$f(\theta) = -\frac{1}{K} \int_0^\infty r' U(r') \sin(Kr') dr' \quad (1.32)$$

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

$$\sigma(\theta) = \left| -\frac{1}{K} \int_0^\infty r' U(r') \sin(Kr') dr' \right|^2 \quad (1.33)$$

La notion du déphasage δ_l est négligeable pour cette approximation.

1.3 Densité de charge électronique

La densité de charge électronique utilisée est calculée à partir des fonctions d'onde atomiques de Slater par la méthode LCAO pour chaque atome de la molécule. La fonction d'onde atomique s'écrit :

$$\Psi_i(r) = \sum_{j=1}^{N_{orb}} a_{ij} \phi_{n_{ij}l_{ij}m_{ij}}^{\xi_{ij}}(r) \quad (1.34)$$

où N_{orb} est le nombre d'orbital atomique de Slater et a_{ij} est le poids statistique correspondant. Les différents nombres quantiques (n_{ij}, l_{ij}, m_{ij}) ainsi que les coefficients (a_{ij}, ξ_{ij}) sont nécessaires à la description de l'état atomique. La fonction d'onde orbitale $\phi_{n_{ij}l_{ij}m_{ij}}^{\xi_{ij}}(r)$ de l'expression (1.34) peut s'écrire comme suit :

$$\phi_{n_{ij}l_{ij}m_{ij}}^{\xi_{ij}}(r) = R_{n_{ij}l_{ij}}^{\xi_{ij}}(r) Y_{l_{ij}}^{m_{ij}}(\theta, \varphi) \quad (1.35)$$

$R_{n_{ij}l_{ij}}^{\xi_{ij}}(r)$ étant la fonction radiale qui s'écrit sous la forme :

$$R_{n_{ij}l_{ij}}^{\xi_{ij}}(r) = \frac{(2\xi_{ij})^{n_{ij}+\frac{1}{2}}}{\sqrt{2n_{ij}!}} r^{n_{ij}-1} e^{-\xi_{ij}r} \quad (1.36)$$

Sachant que les harmoniques sphériques $Y_{l_{ij}}^{m_{ij}}(\theta, \varphi)$ sont normalisés et que la densité de probabilité de présence est le carré de la fonction d'onde atomique, nous sommes donc les 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 :

$$\rho_i(r) = \sum_{j=1}^{N_{orb}} |R_{n_{ij}l_{ij}}(r)|^2 \quad (1.37)$$

Ces distributions seront utilisées par la suite pour calculer la densité de charge $\rho(r)$ de la molécule étudiée qui est donnée comme suit :

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N \rho_i(r) \quad (1.38)$$

1.4 Le potentiel optique

Le potentiel optique utilisé dans ce travail a été utilisé par plusieurs chercheurs [22, 23] qui l'ont appliqué à l'étude des interactions entre particules chargées incidentes et des cibles atomiques et/ou moléculaires. Ce potentiel permet de traiter aussi bien la diffusion élastique des électrons par des cibles sphériques ou non-sphériques. Il est composé de trois termes essentiels qui sont le potentiel statique $V_{st}(r)$, le potentiel d'échange $V_e(r)$ et le potentiel de corrélation-polarisation $V_{cp}(r)$. Les deux premiers termes sont en fonction de la densité de charge électronique de la molécule cible, alors que le potentiel de polarisation dépend particulièrement du moment dipolaire électrique de la cible moléculaire.

1.4.1 Le potentiel statique

C'est le potentiel d'interaction coulombien (électrostatique) entre chaque charge électrique de la cible biomoléculaire et le faisceau projectile. Ce potentiel comporte deux contributions : celle du noyau de numéro atomique Z et celle des couches électroniques.

$$V_{st}(r) = \sum_{i=1}^N V_i(r) + V_{ion}(r) \quad (1.39)$$

où N est le nombre d'atomes de la molécule cible, $V_{ion}(r) = \sum_{i=1}^N \frac{-Z_i}{4\pi\epsilon_0 r_i}$ est la contribution du potentiel ionique et $V_i(r)$ est la contribution électronique de l'atome i dans la molécule. L'expression de ce potentiel est donnée par [24] :

$$V_{st}(r) = \sum_{i=1}^N \frac{-Z_i}{r_i} + 4\pi \int \frac{\rho(r)}{r_{>}} r^2 dr \quad (1.40)$$

avec :

$r_{>} = \max(r, r')$, Z_i est le nombre d'électrons pour chaque atome, r_i est la distance entre l'électron projectile et le noyau de l'atome de la molécule et $\rho(r)$ est la densité de charge de la molécule.

1.4.2 Le potentiel d'échange

Lors d'une interaction, l'électron incident peut prendre la place d'un électron lié et ce dernier sera éjecté de la molécule cible. Ainsi, pour prendre en considération ce phénomène, nous introduisons un potentiel, dit d'échange du Furness-McCarthy. C'est un potentiel qui est souvent utilisé pour le calcul des sections efficaces à basse énergie et qui dépend de l'énergie de l'électron incident comme le montre son expression donnée par [25] :

$$V_{e,FM}(r) = \frac{1}{2} \left(E_i - V_{st}(r) - \sqrt{(E_i - V_{st}(r))^2 + 4\pi\rho(r)} \right) \quad (1.41)$$

où E_i est l'énergie de l'électron projectile, $V_{st}(r)$ est le potentiel statique.

1.4.3 Le potentiel de corrélation - polarisation

Le potentiel de corrélation-polarisation est caractérisé par deux phénomènes ; le premier correspond à la polarisation de la molécule due à la création d'un moment dipolaire entre les électrons repoussés par l'électron incident et les noyaux des atomes, le second (de corrélation) traduit l'interférence entre le nuage électronique de la molécule et la particule incidente. Les interactions responsables de la polarisation de la molécule seront prédominantes lorsque l'électron sera suffisamment loin de la molécule, région où les interférences avec le nuage électronique sont faibles. Il faut donc distinguer deux régions. La première consiste en la région où la polarisation domine

alors que dans la deuxième, les deux potentiels sont du même ordre de grandeur voir même la corrélation est plus importante que la polarisation. Pour déterminer la frontière entre ces deux zones, nous déterminerons tout d'abord la distance pour laquelle les courbes de potentiels se croisent. En effet, il existe plusieurs types de potentiel de corrélation-polarisation et parmi ceux que nous utilisons le long de ce travail, on cite : le potentiel de polarisation de Buckingham et le potentiel de corrélation de Padial-Norcross.

1.4.3.1 Potentiel de polarisation de Buckingham

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

$$V_{p,B}(r) = -\frac{\alpha_d}{2(r^2 + d^2)^2} \quad (1.42)$$

avec :

α_d : Présente la polarisabilité moyenne de la molécule.

d : Paramètre empêchant la divergence du potentiel et est donné par Mittleman et Watson [26] sous la forme :

$$d = \left(\frac{1}{2} \alpha_d Z^{-\frac{1}{3}} b_{pol}^2 \right)^{\frac{1}{4}} \quad (1.43)$$

où b_{pol} est un paramètre ajustable qui dépend de l'énergie incidente, son expression est donnée initialement par Salvat et *al.* [27] :

$$b_{pol} = \sqrt{\max \left\{ \frac{(E_i - 50eV)}{16eV}; 1 \right\}} \quad (1.44)$$

et est améliorée par Aouchiche et *al.*[24] en donnant son expression par :

$$b_{pol} = \sqrt{\max \left\{ \frac{(E_i - 0.5eV)}{0.01eV}; 1 \right\}} \quad (1.45)$$

1.4.3.2 Le potentiel de corrélation de Padial et Norcross

Le potentiel que nous avons utilisé pour décrire les effets de corrélation est proposé par Padial et Norcross [28]. C'est un potentiel dépendant du paramètre r_s qui à son tour dépend de la densité de charge. Padial et Norcross [28] ont proposé des expressions différentes pour ce potentiel en fonction du paramètre r_s :

$$\begin{cases} V_{cor}(r_s) = 0.0311 \log(r_s) + 0.006 r_s \log(r_s) - 0.015 r_s - 0.058 & r_s \leq 0.7 \\ V_{cor}(r_s) = -0.07356 + 0.02224 \log(r_s) & 0.7 \leq r_s \leq 10 \\ V_{cor}(r_s) = \frac{-0.584}{r_s} + 1.988 (r_s)^{-3/2} - 2.45 (r_s)^{-2} - 0.733 (r_s)^{-5/2} & r_s \geq 10 \end{cases} \quad (1.46)$$

où le paramètre r_s est le rayon de la sphère occupé par la charge de chaque électron appelé paramètre de densité et est définie par :

$$r_s = \left(\frac{3}{4\pi\rho(r)} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (1.47)$$

1.5 Notions sur la section efficace

D'un point de vue général, la section efficace est une grandeur physique liée à la probabilité d'interaction (le rapport entre le taux d'interaction et le flux incident) d'une particule avec une autre pour une réaction donnée. Dans un premier temps, on considère dans une direction parallèle à l'axe (oz) un flux F_i de particules incidentes (voir figure 1.1) qui rentrent en collision avec N_i particules cibles. Hors de portée du faisceau incident et à grande distance de la cible, on dispose d'un détecteur D mesurant le nombre de particules diffusées par unité de temps. Le nombre de particules N que l'on détecte par unité de temps est proportionnel au nombre de particules incidentes et au flux F_i . Le coefficient de proportionnalité, noté σ , est donnée par : $\sigma = \frac{N}{N_i F_i}$

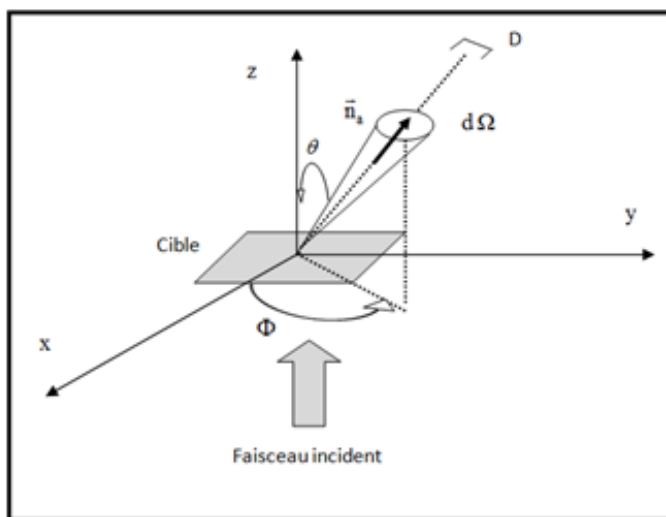


Figure 1.1 – Schéma simplifié relatif à la notion de section efficace

1.5.1 Section efficace différentielle

La distribution angulaire des particules diffusées peut apporter des informations sur les différentes interactions qui ont eu lieu entre le faisceau incident et la biomolécule cible. De plus, en général les détecteurs ont une certaine granularité définie par θ et φ dans un angle solide élémentaire $d\Omega$. On définit ainsi la section efficace différentielle comme étant $\frac{d\sigma}{d\Omega}$.

Dans notre travail, cette dernière quantité s'exprime par la somme des différentes contributions

dues aux différents potentiels intervenants entre la particule chargée incidente et la cible moléculaire, son expression est donnée par :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = I_L + I_S + I_{LS} + I_{SS} + I_{SD}^{(1)} \quad (1.48)$$

Avec :

$$I_L = |f_l|^2 ; \quad (1.49)$$

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

et

$$I_{LS} = 2 |f_l| \sum_{i=1}^N |f_i| \cos(\xi_L - \xi_i) \frac{\sin(KR_i)}{KR_i} \quad (1.51)$$

où f_l et f_i sont les amplitudes de diffusion dues respectivement au potentiel d'interaction à longue portée et au potentiel d'interaction à courte portée de l'atome i de la molécule et sont données par l'expression suivante :

$$f_i(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1) \left(e^{i\delta_l^i} - 1 \right) p_l(\cos(\theta)) \quad (1.52)$$

Les contributions des trois potentiels d'échanges, de corrélations et de polarisations induisent deux contributions dans le calcul de section efficace à savoir I_L et I_{LS} due à leurs interférences avec le potentiel statique. Avec aussi f_l solution de l'équation radiale prenant en compte les potentiels précédents, ξ représentent les phases des amplitudes du diffusion et R_i est la position de l'atome dans le centre de masse de la molécule.

Le terme $\sum_{i \neq j}^N f_i^* f_j \frac{\sin(KR_{ij})}{KR_{ij}}$ noté I_{SS} est relatif aux liaisons inter-atomiques qui prend en compte les interactions entre atomes. f_i et f_j sont respectivement les amplitudes du diffusion des atome i et j . R_{ij} est la distance entre l'atome i et j .

Le terme $I_{SD}^{(1)}$ décrit la section efficace de diffusion multiple de l'électron incident avec la molécule cible, et il définit l'interférence entre la simple et la double diffusion. Il est donné par l'expression suivante :

$$I_{SD}^{(1)} = \frac{i}{k} \sum_{i \neq j}^N (f_i + f_j)^* \sum_{l_1, l_2, l_3} (2l_1 + 1) (2l_2 + 1) (2l_3 + 1) \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \times p_{l_2}(\cos\theta) j_{l_3}^2(kR_{ij}) A_{l_1}(k, j) A_{l_2}(k, i) \quad (1.53)$$

avec $A_l(k, i)$ est définie comme : $A_l(k, i) = e^{i\delta_l^i} \sin(\delta_l^i)$

où δ_l^i est le déphasage de l'atome i , $\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ est le symbole de $3j$

$j_l(x)$ est la fonction sphérique de Bessel à l'ordre l , et $p_l(x)$ est un polynôme de Legendre.

1.5.2 Section efficace intégrée

La section efficace intégrée décrit la réaction globale et permet d'accéder à certains paramètres physiques. Elle est obtenue en intégrant numériquement les sections efficaces différentielles à travers tout l'angle solide de diffusion Ω . La section efficace intégrée est définie donc par :

$$\sigma(E) = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma(E, \theta)}{d\theta} \sin\theta d\theta \quad (1.54)$$

1.6 Description des cibles biomoléculaires

1.6.1 Pyrimidine

La pyrimidine ($C_4H_4N_2$) est un composé organique aromatique hétérocyclique contenant deux atomes d'azote en positions 1 et 3 du cycle à six membres (figure 1.2.a). Elle est considérée comme une molécule modèle pour l'étude des interactions électroniques avec les bases d'ADN et d'ARN [29] en raison de la similitude de sa structure cyclique avec trois de ses bases nucléiques telles que la cytosine ($C_4H_5N_3O$), la thymine ($C_5H_6N_2O_2$) et l'uracile ($C_4H_4N_2O_2$) qui sont des dérivées de pyrimidine.

La molécule pyrimidine contient 42 électrons et 21 orbitales moléculaires et possède également certaines propriétés physicochimiques qui rendent cette molécule intéressante à étudier, celles-ci incluent une polarisabilité moyenne de $\sim 59,3$ u.a [30] et un fort moment dipolaire de 2.33 D [31] ce qui fait que cette molécule est beaucoup étudiée dans les processus de collisions.

1.6.2 Adénine

L'adénine est une molécule chimique de formule brute $C_5H_5N_5$ appartenant à la famille des purines. C'est un composé hétérocyclique contenant 5 atomes d'azotes associés en cycle avec des atomes de carbone (figure 1.2.b). Elle pouvait se concevoir à partir d'un pentamère d'acide cyanhydrique (HCN). D'ailleurs, plusieurs expériences montrent que l'acide cyanhydrique à l'état liquide va permettre spontanément l'apparition d'une infime quantité d'adénine.

La molécule d'adénine est une base nucléique complémentaire qui est lié par deux liaisons d'hydrogènes avec la thymine dans l'ADN ou avec l'uracile dans l'ARN. De plus, elle se caractérise

par le moment dipolaire 2.4563 D et un point de fusion situant entre 360° et 365° et de masse atomique qui vaut 135,127 g/mol. L'adénine contient 70 électrons et 35 orbitales moléculaires.

L'adénine possède plusieurs utilités. D'une part, elle rentre dans la composition des nucléotides, qui sont les monomères des acides nucléiques. La nucléotide contenant l'adénine que l'on retrouve aussi dans l'ADN se nomme la désoxyadénosine mono phosphate, tandis que celui qui compose l'ARN se nomme l'adénosine mono phosphate. D'autre part, la molécule d'adénine contribue à la formation de molécules Adénosine Triphosphate (ATP) qui est une molécule énergétique.

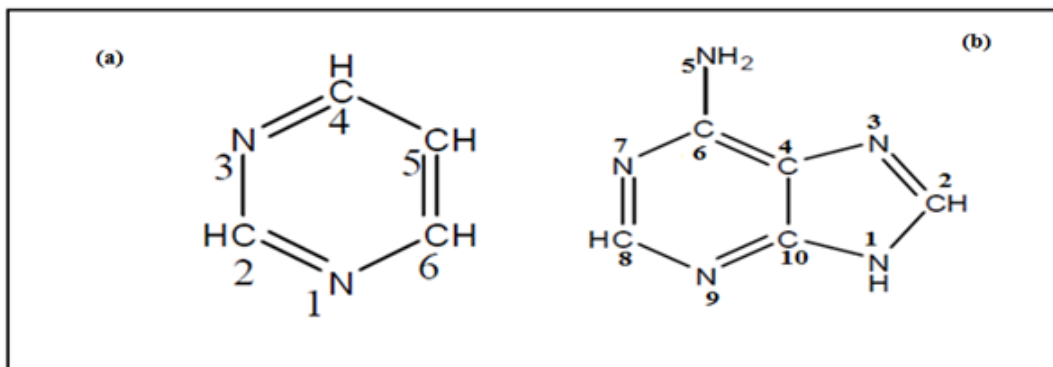


Figure 1.2 – Structures des cibles biomoléculaires : (a)- Pyrimidine ; (b)- Adénine

Chapitre 2

Résultats et discussions

2.1 Introduction

Dans cette partie, nous présentons l'ensemble des résultats obtenus dans le cadre de ce travail portant sur le calcul des sections efficaces de diffusion élastique d'électrons par des biomolécules telles que la pyrimidine et l'adénine. Cette présente étude peut être décomposée en deux parties : la première concerne l'étude des sections efficaces différentielles et totale de la diffusion élastique par la cible pyrimidine et la seconde partie par l'adénine qui sont, toutes les deux, des bases de l'ADN.

2.2 Etude de la diffusion par la pyrimidine

2.2.1 Densité électronique

La figure (2.1) montre de manière très claire la distribution de charges électroniques de la molécule pyrimidine ($C_4H_4N_2$) en fonction de la distance radiale.

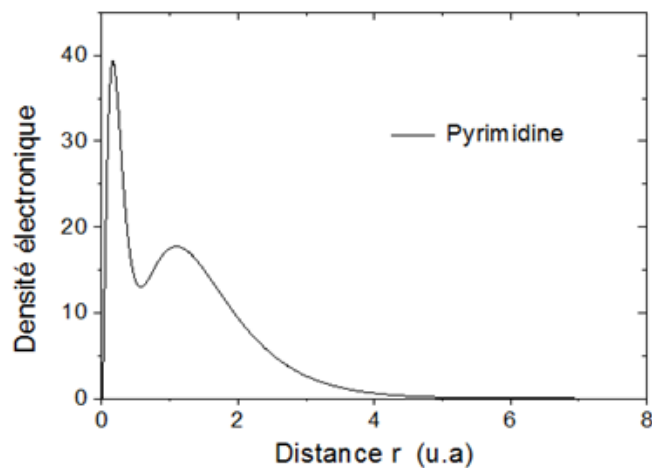


Figure 2.1 – Densité de charge électronique $\rho(r)$ en fonction de la distance radiale r

D'après la figure (2.1), on remarque une distribution maximale des électrons sur la molécule pyrimidine pour une distance $r = 0.15u.a$, puis commence à diminuer jusqu'à atteindre un minimum pour $r = 0.58u.a$ et remonter pour exhiber un maximum aux alentours de $r = 1.1u.a$. Cette densité est significative pour des valeurs de $r \leq 5u.a$; au-delà de cette distance, elle devient quasiment nulle et prend la forme d'une asymptote. On conclut que l'interaction électron-pyrimidine se limite à une distance r inférieure à $5u.a$.

2.2.2 Sections efficaces différentielles (SED)

Les sections efficaces différentielles (SED) de diffusion élastique d'électrons par des molécules pyrimidine ($C_4H_4N_2$) sont calculées par la méthode brièvement décrites dans la partie 1.5.1 en fonction de l'angle de diffusion pour différentes énergies incidentes E_i : $50eV$, $60eV$, $70eV$, $80eV$, $100eV$, $200eV$, $300eV$, $400eV$, $600eV$, $800eV$ et $1000eV$. Ces valeurs ont été choisies en fonction des résultats disponibles dans la littérature pour tester notre méthode. Les différents résultats obtenus sont représentés sur les figures (2.2, 2.3, 2.4) où le terme principal I_S (voir éq. 1.50) est en trait rouge, le terme $I_S + I_{SS}$ en trait bleu et le terme $I_S + I_{SS} + I_L + I_{LS}$ représentant la section efficace différentielle sans la diffusion multiple en trait noir et la section efficace englobant tous les phénomènes physiques en trait vert (voir éq. 1.48).

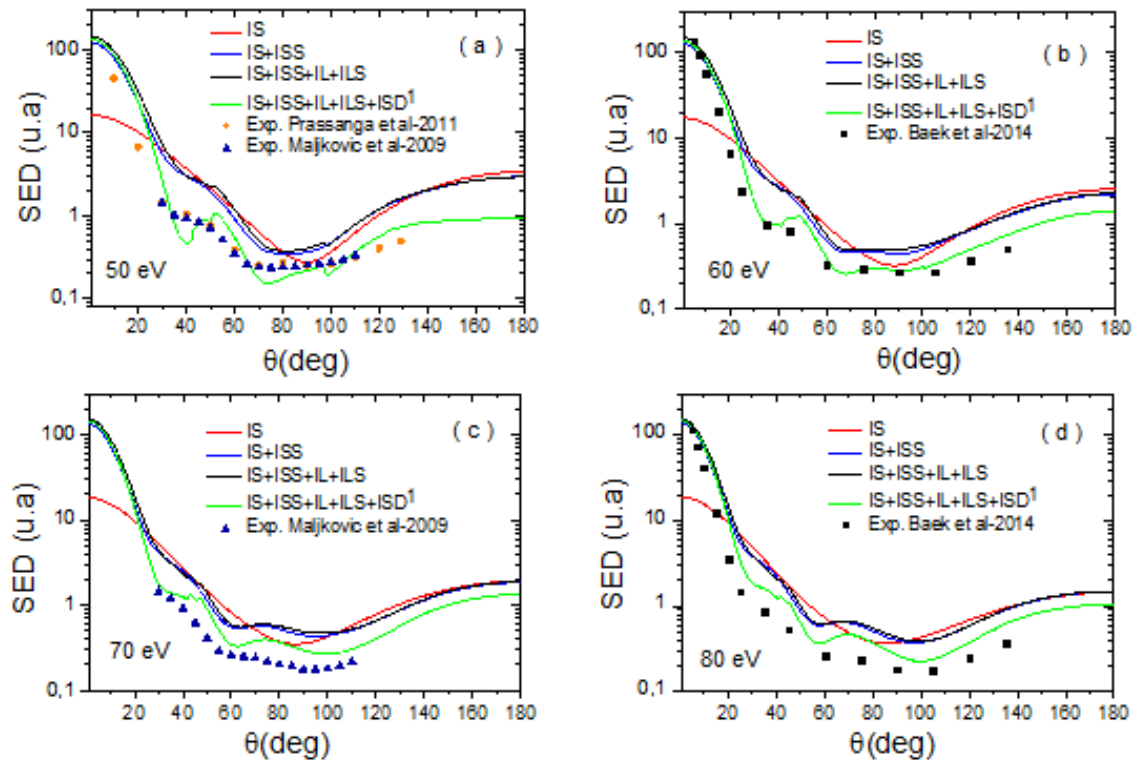


Figure 2.2 – Variation de la section efficace différentielle de la molécule pyrimidine en fonction de l'angle de diffusion θ pour des énergies incidentes de $50eV$, $60eV$, $70eV$ et $80eV$.

Pour une énergie incidente $E_i = 50eV$ (figure 2.2.a), on remarque que lorsqu'on introduit uniquement le terme I_S (la courbe rouge) qui représente la section efficace due à la contribution du potentiel statique qui est à courte portée, son amplitude est importante à faible angle de diffusion ($\theta \leq 10^\circ$) et puis diminue jusqu'à atteindre un minimum aux environs du $\theta = 90^\circ$, ensuite la section efficace augmente. En outre, nous observons que lorsque nous rajoutons la contribution inter-atomique I_{SS} (la courbe bleue), l'amplitude augmente pour des faibles angles de diffusion. Nous remarquons aussi pour les angles de diffusion $\theta = 30^\circ$, $\theta = 80^\circ$ et $\theta = 140^\circ$ que l'effet des liaisons inter-atomiques de la molécule (le terme I_{SS}) est négligeable. Dans la direction perpendiculaire ($\theta = 90^\circ$) de diffusion, nous constatons que la profondeur du minimum vu précédemment est légèrement diminuée et décalée vers l'angle $\theta = 80^\circ$. En tenant compte de deux autres contributions des sections efficaces I_L et I_{LS} 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 (voir la courbe noir de la figure 2.2.a), on constate que l'amplitude a légèrement augmenté pour les faibles angles de diffusion, de plus nous observons l'apparition d'oscillations pour des angles de diffusion inférieurs à 100° dues au potentiel à longue portée. Par ailleurs, la contribution de I_L et I_{LS} sont négligeables devant la contribution de I_{SS} pour des angles de diffusion supérieurs à 100° . Par contre, la courbe verte (figure 2.2.a) montre de manière claire que la contribution ramenée par le terme de diffusion multiple $I_{SD}^{(1)}$ induit une diminution de l'amplitude de diffusion sur toute la gamme d'angle de diffusion. Enfin, la comparaison des résultats obtenus, pour les sections efficaces différentielles de la diffusion élastique d'électrons par la cible pyrimidine pour une énergie de $50eV$ avec les mesures expérimentales rapportées par Prassanga et *al.* [32] et Maljkovic et *al.* [16] montrent un accord globalement satisfaisant.

Pour une énergie incidente $E_i = 60eV$ (figure 2.2.b), on remarque presque les mêmes évolutions des termes des sections efficaces différentielles, sauf que la contribution de I_{SS} fait apparaître un peu plus d'oscillations. Ces dernières caractérisent les interférences dues aux liaisons inter-atomiques de la molécule. Dans la gamme angulaire allant de $\theta = 110^\circ$ à $\theta = 180^\circ$, les effets d'échange, corrélation et polarisation sont négligeables. On constate aussi que la section efficace différentielle globale adopte le même comportement que celui observé précédemment pour une énergie de $50eV$ (courbe verte de la figure 2.2.a), avec toute fois une légère réduction dans la profondeur des minimas. On note que la section efficace englobant tous les phénomènes physiques est en bon accord avec les résultats expérimentaux de Baek et *al.* [17].

Pour des énergies incidentes $E_i = 70eV$ (figure 2.2.c) et $E_i = 80eV$ (figure 2.2.d), le minimum observé aux alentours de $\theta = 90^\circ$ pour la section efficace statique I_S , (la courbe rouge) s'élargit avec l'augmentation de l'énergie incidente. De plus, on constate que l'influence du terme d'interactions inter-atomique I_{SS} persiste pour des faibles angles de diffusion. Par contre, cette interaction devient négligeable à partir de $\theta = 155^\circ$ pour une énergie incidente $E_i = 70eV$ et à partir de $\theta = 140^\circ$ pour $E_i = 80eV$. L'effet des termes I_L et I_{LS} est faible pour des angles de diffusion

$\theta \leq 100^\circ$ et devient négligeable au-delà de cet angle de diffusion. Le terme de la diffusion multiple $I_{SD}^{(1)}$ présente toujours des effets sur toute la gamme des angles de diffusion. Nos résultats sont en bon accord avec les mesures expérimentales de Maljkovic *et al.* [16] et Baek *et al.* [17].

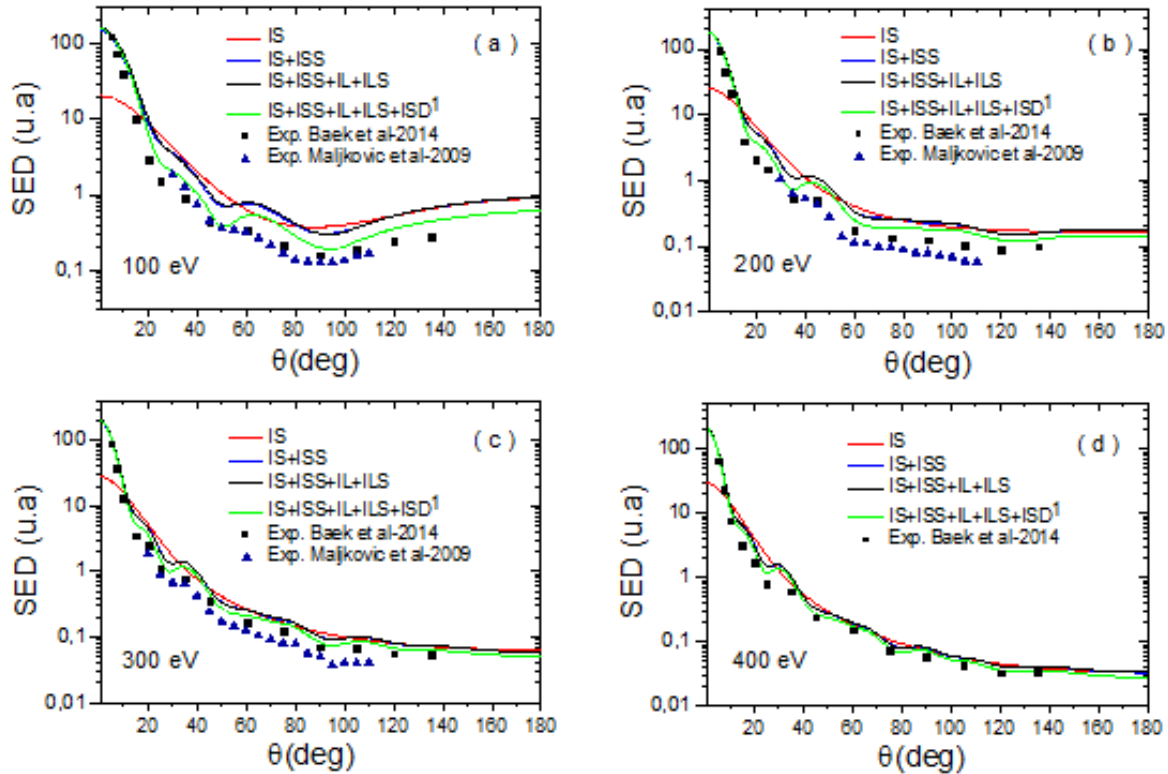


Figure 2.3 – Variation de la section efficace différentielle de la molécule pyrimidine en fonction de l'angle de diffusion θ pour des énergies incidentes de 100eV, 200eV, 300eV et 400eV.

La figure (2.3) représente la variation de la section efficace différentielle correspondant à des énergies incidentes de 100eV (figure 2.3.a), 200eV (Figure 2.3.b), 300eV (figure 2.3.c) et 400eV (figure 2.3.d). Nous observons, pour ces énergies, que l'amplitude du terme I_S est plus importante pour les angles de diffusion inférieurs à 10° . Cependant, la contribution du terme inter-atomique I_{SS} (courbe bleu) devient négligeable en augmentant l'énergie du projectile pour des angles de diffusion importants. Par ailleurs, l'effet inter-atomique joue un rôle important pour des angles de diffusion $\theta < 10^\circ$. Ainsi les contributions des termes I_L et I_{LS} sont négligeables sur toute la gamme angulaire de diffusion, et cela est dû aux fait que les potentiels de corrélation-polarisation et d'échange (potentiels à longue portée) ont un effet réduit pour des énergies supérieures à 100eV.

Pour l'énergie incidente $E_i = 100eV$ (figure 2.3.a), la section efficace différentielle englobant tous les termes physiques, montre clairement deux minima aux alentours de $\theta = 50^\circ$ et $\theta = 90^\circ$ avec deux profondeurs différentes, tandis que pour l'énergie incidente $E_i = 200eV$ (figure 2.3.b), ces minima diminuent de profondeur et les amplitudes ont nettement diminué et rapproché entre eux

pour des angles de diffusion élevés. Alors que pour $E_i = 300\text{eV}$ (figure 2.3.c) et $E_i = 400\text{eV}$ (figure 2.3.d), on constate que l'influence du terme de la diffusion multiple $I_{SD}^{(1)}$ est devenue très minime et la section efficace évolue de manière monotone avec des légères fluctuations. La comparaison des section efficaces différentielles calculées avec les résultats expérimentaux de Maljkovic et *al.* [16] montre un accord satisfaisant pour des énergies de 100eV et 200eV . Par ailleurs, pour des énergies incidentes de 300eV et 400eV , nos résultats sont en bon accord avec ceux obtenus expérimentalement par Baek et *al.* [17]

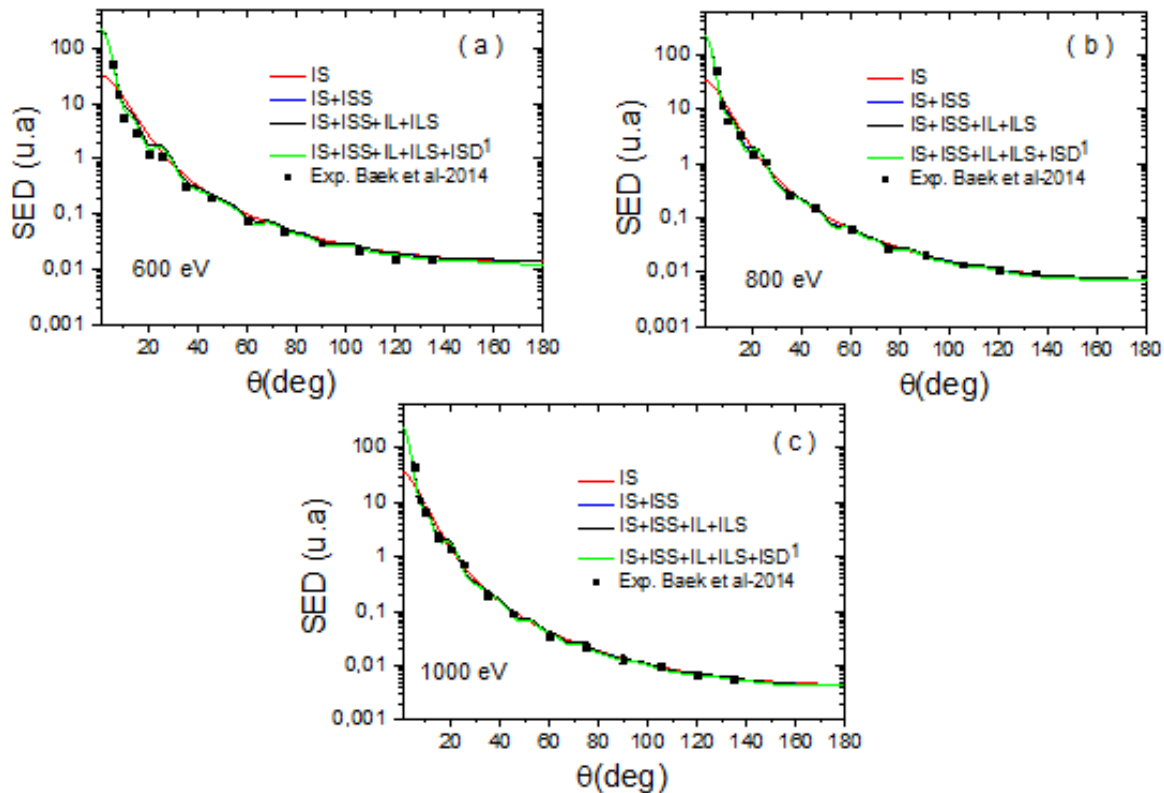


Figure 2.4 – Variation de la section efficace différentielle de la molécule pyrimidine en fonction de l'angle de diffusion θ pour des énergies incidentes de 600eV , 800eV et 1000eV .

La figure (2.4) montre de manière très claire le comportement des sections efficaces différentielles en fonction de l'angle de diffusion pour des énergies incidentes de 600eV , 800eV et 1000eV . La première remarque importante que nous devons mentionner consiste en l'accord très satisfaisant entre les sections efficaces différentielles calculées dans ce modèle et les résultats expérimentaux obtenus par Baek et *al.* [17]. Ainsi les ressemblances entre les différentes contributions de sections efficaces différentielles calculées sont dues aux effets de corrélation, polarisation, échange et la diffusion multiple qui sont négligeables sur toute la gamme des angles de diffusion. On constate aussi que la contribution du terme inter-atomique I_{SS} est plus important pour les angles de diffusion $\theta \leq 5^\circ$ et au delà de cet angle, l'influence de terme I_{SS} devient minimale.

2.2.3 Section efficace intégrale de la molécule pyrimidine

En intégrant les sections efficaces différentielles sur l'angle solide Ω , on aboutit à la section efficace intégrale pour la diffusion élastique électronique par la molécule pyrimidine. Cette dernière est calculée à l'aide de deux méthodes complémentaires.

Pour les énergies d'impact inférieures à 20keV , nous avons utilisée le modèle des ondes partielles qui constitue la base de notre calcul et qui a été utilisé avec succès par Aouchiche et *al.* pour les molécules H_2S , H_2O , HCl et NH_3 [20, 24, 33, 34], quant aux énergies supérieures à 20keV , nous avons utilisé la première approximation de Born car la cible est faiblement perturbée étant donnée la vitesse importante des électrons incidents. Cette approche a été utilisée avec succès par Champion et ses collaborateurs [35] pour étudier l'ionisation de l'eau.

La figure (2.5) représente la variation de la section efficace intégrale (SEI) de la molécule de pyrimidine pour des énergies incidentes allant de 20eV jusqu'à 5MeV . On remarque que l'amplitude de la section efficace est plus importante pour les basses énergies incidentes, puis décroît de façon monotone avec l'augmentation de l'énergie incidente.

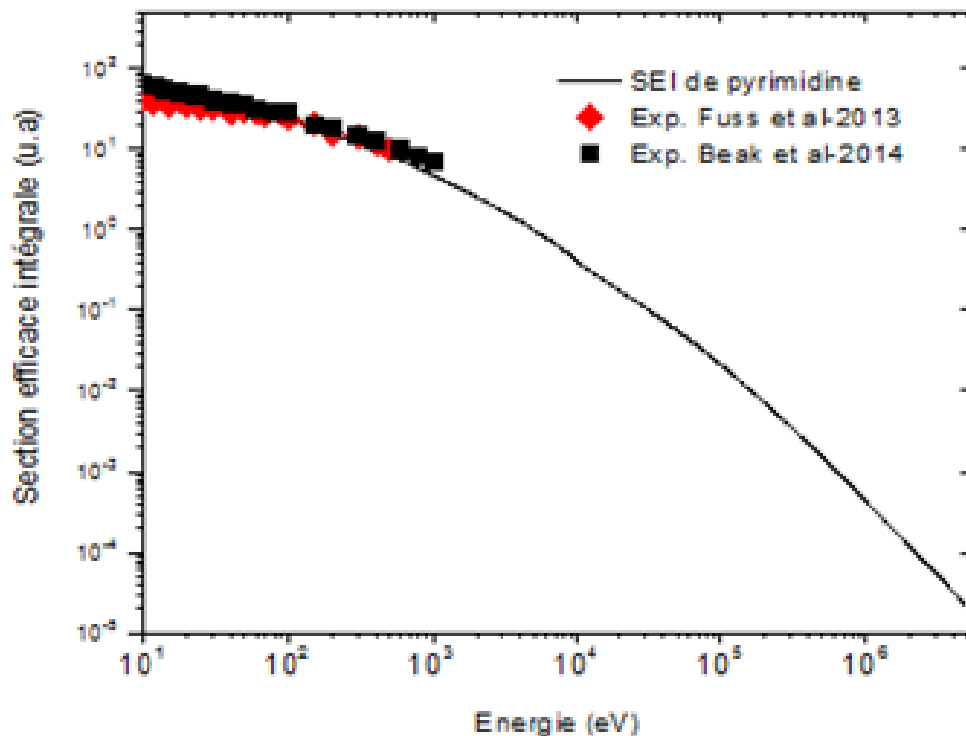


Figure 2.5 – Variation de la section efficace intégrale de diffusion élastique d'électrons par la molécule pyrimidine en fonction de l'énergie des électrons incidents.

Pour valider notre modèle, nous avons comparé nos résultats aux résultats expérimentaux obtenus par Fuss et *al.* [36] dans la plage d'énergie incidente allant de 8eV à 500eV (losange rouge) et

ceux obtenus par Baek et *al.* [17] dans la gamme d'énergie allant de $10eV$ à $1000eV$ (carré noir). Nos résultats sont en parfait accord avec les résultats expérimentaux dans toute la gamme des énergies incidentes. Par ailleurs, nous n'avons pas pu comparer pour des énergies supérieures à $1KeV$ car, à notre connaissance, il n'y a pas de résultats expérimentaux dans la littérature.

2.3 Etude de la diffusion par l'adénine

2.3.1 Densité électronique

La figure (2.6) représente de manière très claire la distribution de charges électroniques de la molécule d'adénine ($C_5H_5 N_5$) en fonction de la distance radiale.

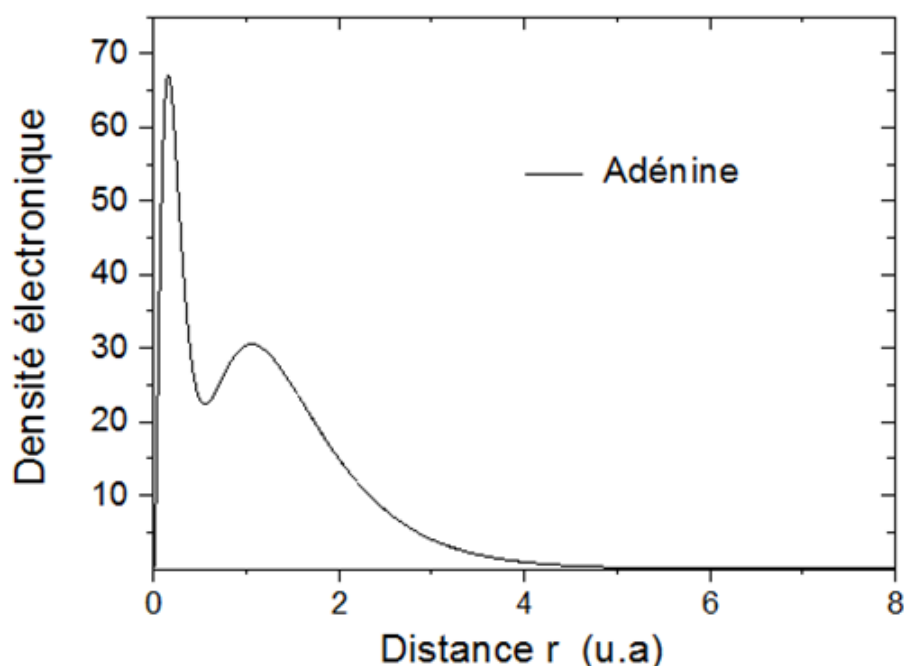


Figure 2.6 – Densité de charge électronique $\rho(r)$ en fonction de la distance radiale r

D'après la figure (2.6), on remarque que la densité électronique de la molécule d'adénine présente une allure similaire à celle de la molécule de pyrimidine, avec une différence dans le nombre d'électrons existant dans chaque molécule. En effet, on voit toujours la présence de deux maxima pour les deux distances atomiques $r = 0.15u.a$ et $r = 1u.a$ respectivement, et une distribution minimale pour $r = 0.56u.a$. On constate également que cette densité tend vers zéro à partir de $r = 5u.a$, et cela veut dire que l'interaction électron-adénine se limite aussi à une distance r inférieure à $5u.a$.

2.3.2 Sections efficaces différentielles (SED)

Les sections efficaces différentielles (SED) de diffusion élastique d'électrons par des molécules d'adénine ($C_5H_5N_5$) sont calculées par la même méthode décrite précédemment en fonction de l'angle de diffusion. Comme il n'y a pas de résultats expérimentaux dans la littérature pour cette molécule d'adénine, nous avons comparé nos résultats à ceux des modèles théoriques disponibles dans la littérature et obtenus par Mozejko *et al.* [6] et Blanco *et al.* [7] pour des énergies d'incidences suivantes : $50eV$, $100eV$, $200eV$ et $1000eV$. Les différents résultats obtenus sont représentés sur les figures (2.7, 2.8, 2.9) pour les mêmes énergies incidentes que la molécule pyrimidine tout en gardant la même légende que celle faite pour cette molécule de pyrimidine.

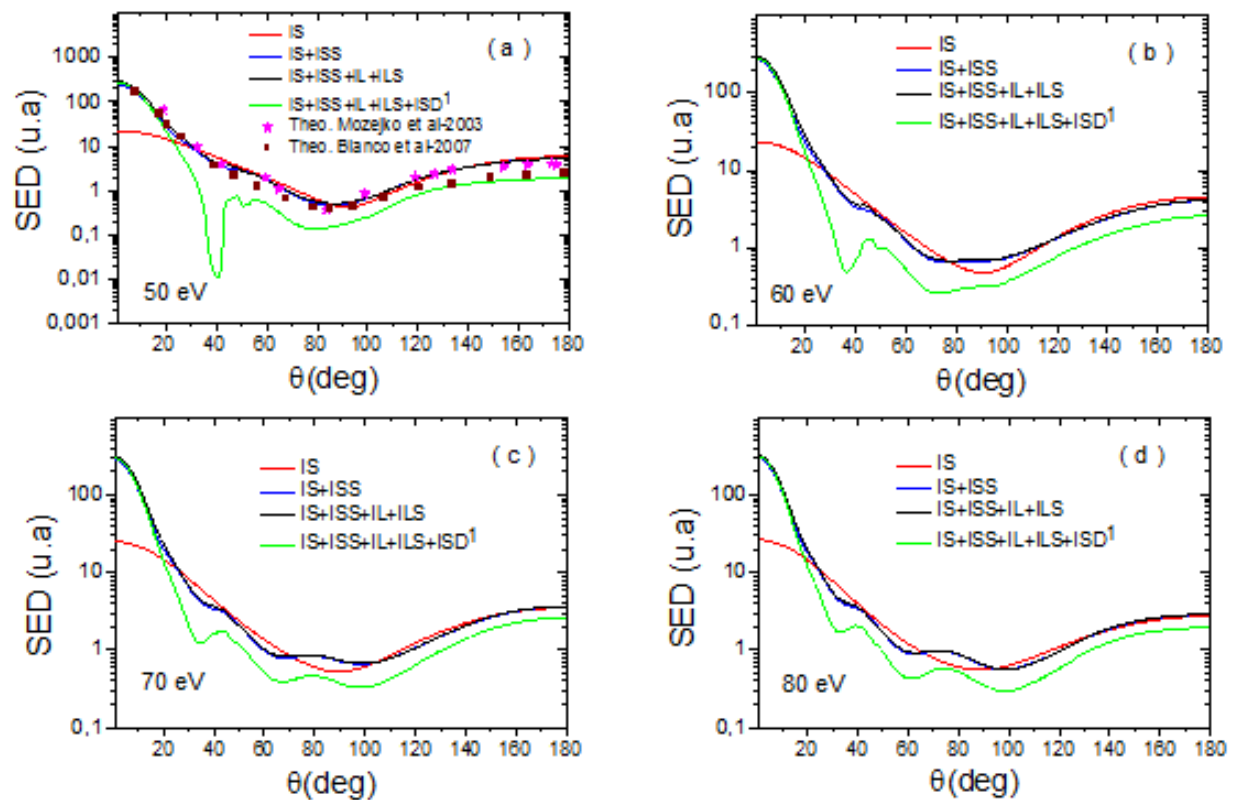


Figure 2.7 – Variation de la section efficace différentielle de la molécule d'adénine en fonction de l'angle de diffusion θ pour des énergies incidentes de $50eV$, $60eV$, $70eV$ et $80eV$.

La figure (2.7) indique que les termes de section efficace varient presque de la même façon que ceux de la molécule pyrimidine. Pour une énergie incidente $E_i = 50eV$, la figure (2.7.a) montre que le terme statique I_S (courbe rouge) a une amplitude importante pour des faibles angles de diffusion ($\theta \leq 10^\circ$), ensuite elle diminue jusqu'à atteindre un minimum aux environs de $\theta = 90^\circ$ 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 et elle est plus importante que celle mesurée par la molécule pyrimidine pour des angles de diffusion $\theta \leq 10^\circ$. On remarque

aussi que l'effet d'interaction entre les atomes de la molécule (inter-atomique I_{SS}) est négligeable devant la contribution du potentiel à courte portée pour les angles de diffusion $\theta = 30^\circ$ et $\theta = 85^\circ$ et dans la gamme angulaire comprise entre $\theta = 135^\circ$ et $\theta = 145^\circ$. De plus, le minimum du terme I_S à $\theta = 90^\circ$ est légèrement décalé vers l'angle $\theta = 85^\circ$. En tenant compte des deux contributions des potentiels à longues portées I_L et leurs interférences avec le potentiel à courte portée I_{LS} , l'amplitude a légèrement augmenté pour les faibles angles de diffusion. Par contre, ces deux contributions (I_L et I_{LS}) ont un effet négligeable devant le terme inter-atomique I_{SS} dans la plage angulaire allant de $\theta = 50^\circ$ à $\theta = 70^\circ$ et pour des angles de diffusion $\theta \geq 100^\circ$. Alors que pour le terme englobant tous les phénomènes physiques (courbe verte), on voit clairement un minimum plus profond ($0.01u.a$) pour $\theta = 40^\circ$ par rapport à celui induit par la molécule pyrimidine pour le même angle. Aussi, l'introduction du terme $I_{SD}^{(1)}$ a fait nettement diminuer l'amplitude sur toute la gamme angulaire de diffusion. Il est à noter que nos résultats, sans tenir compte de la contribution de la diffusion multiple, sont en accord avec les résultats de ces modèles théoriques, sauf que pour des angles très élevés ($\theta \geq 140^\circ$), les résultats du modèle de Blanco et al. [7] sont plus proches du terme de la section efficace globale.

Pour une énergie incidente de $60eV$ (figure 2.7.b), on remarque que le terme statique I_S suit presque la même variation que l'énergie de $50eV$, alors que la contribution inter-atomique I_{SS} a une influence importante à faible angle de diffusion. Par contre, elle devient négligeable devant le terme du potentiel statique qu'est à courte portée pour les angles $\theta = 27^\circ$ et $\theta = 77^\circ$, ainsi que pour des angles de diffusion allant de $\theta = 115^\circ$ à $\theta = 123^\circ$. De plus, le minimum observé à $\theta = 85^\circ$ s'est élargi. Tandis que les deux contributions I_L et I_{LS} ont un léger effet pour les faibles angles de diffusion. Par ailleurs, cet effet devient négligeable devant la contribution inter-atomique dans la gamme angulaire comprise entre $\theta = 50^\circ$ et $\theta = 60^\circ$ et pour des angles de diffusion $\theta \geq 77^\circ$. Concernant la section efficace globale, on remarque que la profondeur du minimum vu pour $E_i = 50eV$ à $\theta = 40^\circ$ est réduite et l'amplitude de ce terme a aussi diminué à cause de l'influence imposée par la diffusion multiple.

Les figures (2.7.c) et (2.7.d) montrent pour des énergies incidentes $E_i = 70eV$ et $E_i = 80eV$ respectivement, que le terme d'interaction inter-atomique I_{SS} impose toujours son effet pour les faibles angles de diffusion. Alors que cette interaction ne joue aucun rôle à partir de l'angle de diffusion $\theta = 150^\circ$ pour $E_i = 70eV$ et à partir de $\theta = 130^\circ$ pour l'énergie incidente $E_i = 80eV$, on note aussi l'apparition des oscillations qui caractérisent les interférences dues aux liaisons inter-atomiques de la molécule d'adénine. On constate également que l'influence des termes I_L et I_{LS} est faible pour des faibles angles de diffusion ($\theta \leq 20$) tandis qu'elle est entièrement négligeable pour des angles de diffusion $\theta \geq 45^\circ$. Par ailleurs, l'effet du terme de la diffusion multiple $I_{SD}^{(1)}$ est faible pour des angles $\theta \leq 15^\circ$ et devient important au-delà de cet angle avec des oscillations ramenées par ce terme.

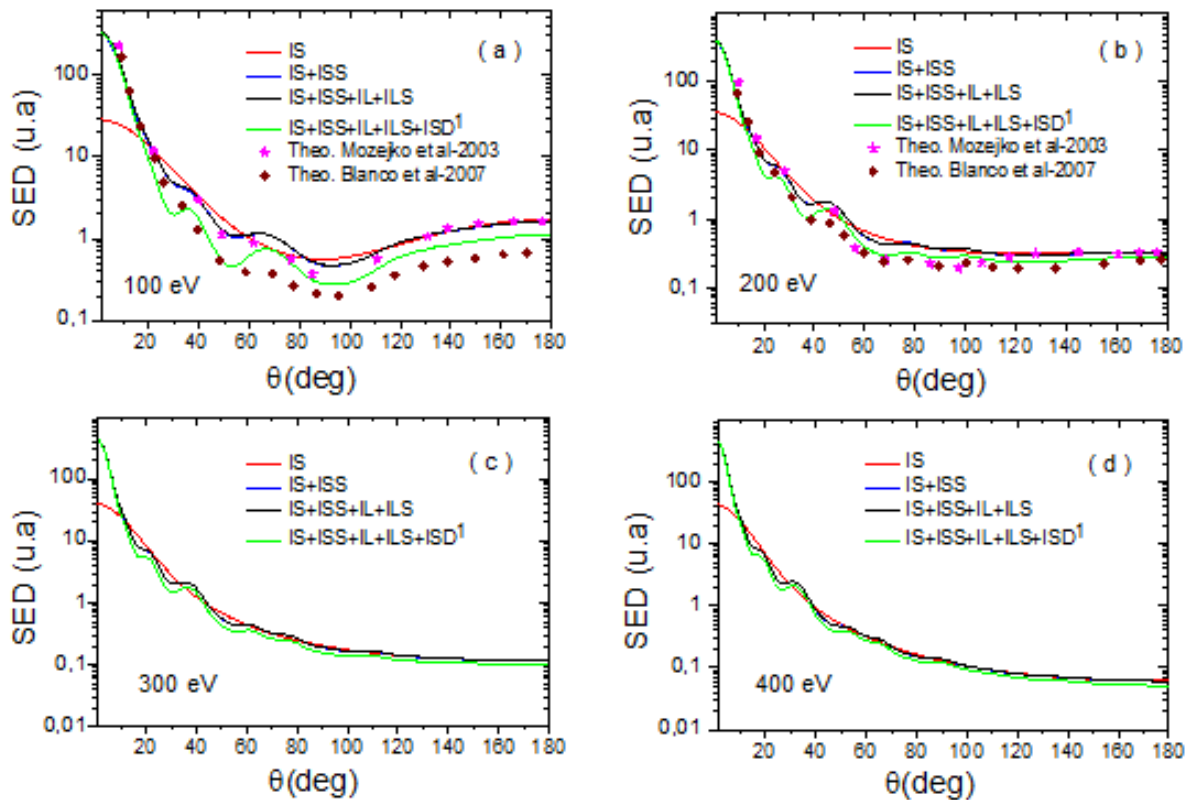


Figure 2.8 – Variation de la section efficace différentielle de la molécule d’adénine en fonction de l’angle de diffusion θ pour des énergies incidentes de 100eV, 200eV, 300eV et 400eV.

La figure (2.8) représente la variation de la section efficace différentielle correspondant à des énergies incidentes de 100eV (figure 2.8.a), 200eV (figure 2.8.b), 300eV (figure 2.8.c) et 400eV (figure 2.8.d). On remarque pour ces énergies, comme pour la molécule de pyrimidine, que l’amplitude du terme de la section efficace due à la contribution du potentiel statique I_S est importante pour des faibles angles de diffusion ($\theta \leq 10^\circ$) et le minimum de ce terme vu pour les énergies de la figure (2.7) s’est aplati pour $E_i = 100eV$, alors qu’il a complètement disparu à partir de $E_i = 200eV$. On remarque aussi que le terme d’interaction inter-atomique I_{SS} a un effet important pour $\theta \leq 10^\circ$, tandis que son influence est négligeable devant la contribution du potentiel à courte portée à partir de l’angle de diffusion $\theta = 110^\circ$ pour l’énergie incidente $E_i = 100eV$, à partir de $\theta = 80^\circ$ pour $E_i = 200eV$ et à partir de $\theta = 50^\circ$ pour $E_i = 400eV$. Par ailleurs les effets des potentiels d’échange, de corrélation-polarisation ne jouent aucun rôle pour ces énergies sur toute la gamme des angles de diffusion. On constate également que le terme de la diffusion multiple présente des oscillations qui caractérisent l’interférence entre la simple et la double diffusion pour $E_i = 100eV$ et son influence devient faible avec l’augmentation de l’énergie incidente. On remarque aussi pour l’énergie incidente $E_i = 100eV$, un bon accord avec le modèle de Blanco et al. [7] pour les angles de diffusion $\theta \leq 60^\circ$ et une légère différence avec ces deux modèles théoriques par rapport au terme qui contient la diffusion multiple pour des angles de diffusion élevés. De plus, pour l’énergie

incidente $E_i = 200eV$, nos résultats sont très proches de ceux de Blanco et *al.* [7] et Mozejko et *al.* [6].

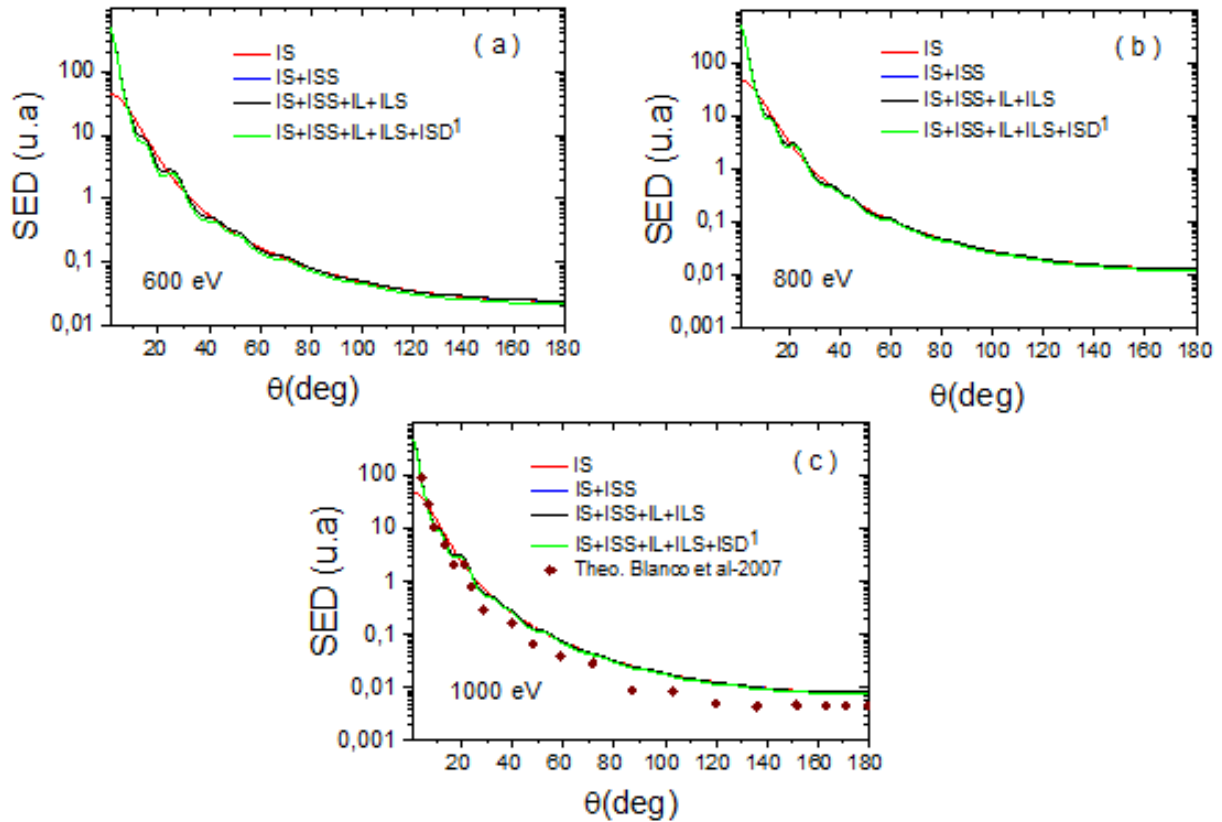


Figure 2.9 – Variation de la section efficace différentielle de la molécule d’adénine en fonction de l’angle de diffusion θ pour des énergies incidentes de $600eV$, $800eV$ et $1000eV$.

On constate d’après la figure (2.9) qui représente la variation des sections efficaces différentielles en fonction de l’angle de diffusion pour des énergies incidentes de $600eV$, $800eV$ et $1000eV$, que le comportement de ces sections efficaces sont identiques à celles mesurées par la molécule pyrimidine pour les mêmes énergies. En effet, on constate qu’en augmentant l’impact d’énergie du projectile, le terme relatif aux liaisons inter-atomique I_{SS} ainsi que les contributions des potentiels à longues portées et de la diffusion multiple ont un effet négligeable devant la contribution I_S qui est due au potentiel à courte portée sur toute la gamme angulaire de diffusion, mis à part le terme I_{SS} qui présente son effet pour des angles de diffusion inférieurs à 10° . D’un point de vue général, pour l’énergie incidente de $1000eV$, nous observons que nos sections efficaces différentielles sont légèrement plus élevées par rapport à celles obtenues par Blanco et *al.* [7]. Cette légère différence est probablement due au fait que Blanco a utilisé uniquement le potentiel de polarisation au lieu du potentiel de corrélation-polarisation.

2.3.3 Section efficace intégrale de la molécule d'adénine

Pour le calcul de la section efficace intégrale pour la diffusion élastique d'électrons par la molécule d'adénine, on a suivi exactement la même procédure que celle décrite précédemment pour la molécule pyrimidine. La figure (2.10) représente la variation de la section efficace intégrée (SEI) de la molécule d'adénine pour des énergies incidentes allant de 10eV jusqu'à 5MeV . En effet, on voit qu'elle varie de manière identique que la SEI de pyrimidine et cela pour les mêmes énergies incidente (strictement décroissante avec l'augmentation de l'énergie du projectile). Cependant, en raison de l'indisponibilité des résultats expérimentaux pour cette molécule d'adénine, on compare nos résultats uniquement avec les modèles théoriques obtenus par Mozejko et *al.* [6] pour des énergies allant 50eV à 3000eV ainsi que par Blanco et *al.* [7] dans la plage d'énergie allant de 5eV à 10000eV .

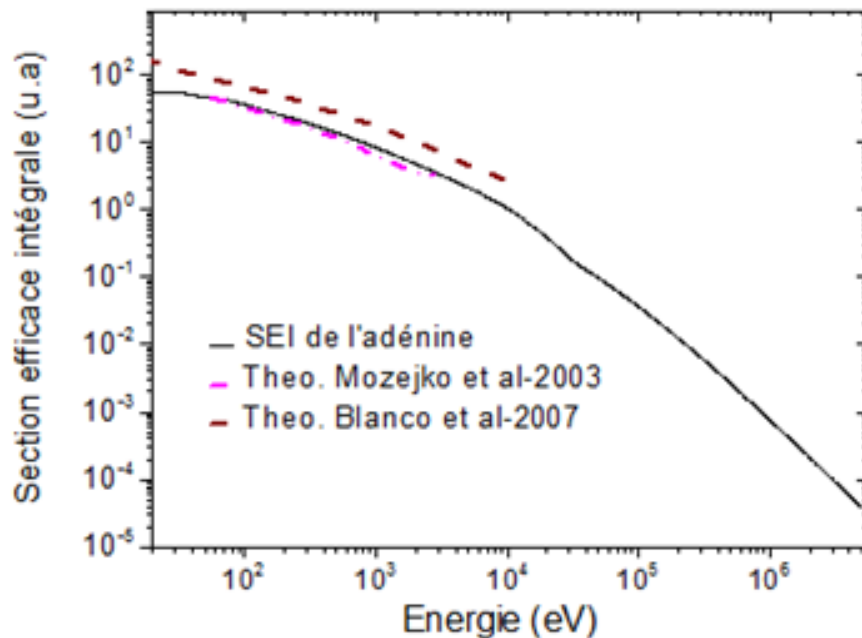


Figure 2.10 – Variation de la section efficace intégrale de diffusion élastique d'électrons par la molécule d'adénine en fonction de l'énergie des électrons incidents.

D'après la figure (2.10), on constate que nos résultats sont en très bon accord avec les résultats du modèle théorique de Mozejko et *al.* [6]. Par contre, on remarque une légère différence dans l'amplitude qui a un peu augmenté d'après les résultats théoriques de Blanco et *al.* [7] et cela est dû au fait que ce dernier n'a pas pris en considération l'effet du potentiel de corrélation.

Conclusion générale

Le travail présenté dans le cadre de ce mémoire porte sur l'étude de l'interaction de particules chargées avec des biomolécules de types bases azotées de l'acide désoxyribonucléique (ADN) telles que la pyrimidine et l'adénine. Nous nous sommes intéressés plus particulièrement aux sections efficaces différentielles et intégrales de la diffusion élastique des électrons par des molécules de pyrimidine et d'adénine. Notre objectif consiste essentiellement à calculer des sections efficaces différentielles et intégrales de la diffusion élastique pour différentes valeurs d'énergies incidentes dans toute la gamme angulaire.

Avant d'entamer la présentation des résultats de ce travail, nous avons d'abord rappelé les bases théoriques de la diffusion élastique où nous avons donné un aperçu sur les méthodes de calculs de 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 d'interaction mis en jeu, en tenant compte des interactions entre l'électron projectile et les électrons de la cible. Dans cette interaction, nous avons considéré une contribution statique issue des fonctions d'ondes moléculaires et des contributions fines dues aux effets de corrélation-polarisation et d'échange. Ainsi nous avons rajouté d'autres phénomènes physiques tels que l'interaction inter-atomique et la diffusion multiple intervenant dans le processus de la diffusion élastique et nous avons terminé le premier chapitre par la description des cibles biomoléculaires (pyrimidine et adénine).

Le second chapitre de ce travail, a fait l'objet de l'analyse des différents résultats de la section efficace élastique obtenu pour les deux cibles biomoléculaires (pyrimidine et adénine) par impact d'électrons. Les différents effets de ces phénomènes physiques : échange, corrélation-polarisation, interaction inter-atomique et la diffusion multiple sont clairement mis en évidence par les résultats obtenus. Par ailleurs, la forme et l'amplitude des différentes distributions angulaires des sections efficaces élastiques différentielles et intégrales obtenues pour chaque cible biomoléculaire (pyrimidine, adénine) ont été rapportées et analysées. L'analyse de ces résultats montre une similitude des sections efficaces différentielles et intégrales obtenues pour ces deux cibles biomoléculaires avec des amplitudes différentes. Nous retenons que pour des énergies incidentes inférieures à $200eV$, la section efficace due au potentiel statique admet un minimum aux environ de l'angle de diffusion $\theta = 90^\circ$ et s'élargit pour des énergies incidentes supérieures à $200eV$. On a constaté aussi que

la contribution du terme d'interaction inter-atomique est négligeable dans la gamme des angles de diffusion élevés, notamment pour des énergies incidentes supérieures à $70eV$. Par contre pour les hautes énergies, cette contribution est importante pour les très faibles angles de diffusion, à savoir des angles inférieurs ou égaux à 10° puis devient négligeable au-delà de cet angle. Nous avons noté aussi que les effets des potentiels d'échange et de corrélation-polarisation sont relativement important pour des énergies incidentes inférieures ou égales à $100eV$. Alors que leurs effets deviennent négligeables pour des énergies supérieures à $100eV$ sur toute la gamme des angles de diffusion. Concernant le terme de la diffusion multiple, on a remarqué qu'il présente une influence importante à basses énergies incidentes. Par ailleurs, cette influence diminue avec l'augmentation de l'énergie jusqu'à devenir entièrement négligeable sur toute la gamme d'angles de diffusion pour des énergies incidentes supérieures à $600eV$.

La comparaison de nos résultats aux mesures disponibles dans la littérature a montré un bon accord sur toute la gamme des angles de diffusion et pour différentes énergies incidentes. Quant aux sections efficaces intégrales pour des énergies allant de $10eV$ à $5MeV$, nous avons obtenu un très bon accord avec les résultats expérimentaux.

Nous souhaitons avoir contribué par ce travail à ramener un plus à l'interaction d'une particule chargée avec la matière vivante. Il nous paraît très pertinent d'introduire d'autre potentiel d'interaction afin d'ouvrir d'autres voies pour l'étude des phénomènes physiques intervenants dans la diffusion élastique. Par ailleurs, il nous paraît également intéressant d'appliquer le modèle actuel à d'autres molécules biologiques contenues dans le corps humain par impact de positrons et de protons.

Bibliographie

- [1] Hans Bethe. Zur theorie des durchgangs schneller korpuskularstrahlen durch materie. *Annalen der Physik*, 397(3) :325–400, 1930.
- [2] U Fano. Penetration of protons, alpha particles, and mesons. *Annual Review of Nuclear Science*, 13(1) :1–66, 1963.
- [3] C Peroval, F Debeaufort, A-M Seuvre, B Chevet, D Despre, and A Voilley. Modified arabinoxytan-based films. part b. grafting of omega-3 fatty acids by oxygen plasma and electron beam irradiation. *Journal of agricultural and food chemistry*, 51(10) :3120–3126, 2003.
- [4] Colleen DesRosiers, V Moskvina, Alex F Bielajew, and L Papiez. 150-250 mev electron beams in radiation therapy. *Physics in Medicine & Biology*, 45(7) :1781, 2000.
- [5] JF Ward. Biochemistry of dna lesions. *Radiation research*, 104(2s) :S103–S111, 1985.
- [6] Paweł Możejko and Léon Sanche. Cross section calculations for electron scattering from dna and rna bases. *Radiation and environmental biophysics*, 42(3) :201–211, 2003.
- [7] F Blanco and G García. Calculated cross sections for electron elastic and inelastic scattering from dna and rna bases. *Physics Letters A*, 360(6) :707–712, 2007.
- [8] F Blanco and G García. A screening-corrected additivity rule for the calculation of electron scattering from macro-molecules. *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics*, 42(14) :145203, 2009.
- [9] Paweł Możejko, Elżbieta Ptasińska-Denga, Alicja Domaracka, and Czesław Szmytkowski. Absolute total cross-section measurements for electron collisions with tetrahydrofuran. *Physical Review A*, 74(1) :012708, 2006.
- [10] Stefano Tonzani and Chris H Greene. Low-energy electron scattering from dna and rna bases : Shape resonances and radiation damage. *The Journal of chemical physics*, 124(5) :054312, 2006.
- [11] CJ Colyer, Violaine Vizcaino, JP Sullivan, Michael J Brunger, and SJ Buckman. Absolute elastic cross-sections for low-energy electron scattering from tetrahydrofuran. *New Journal of Physics*, 9(2) :41, 2007.

- [12] Thi Phuong Thao Do, M Leung, Martina Fuss, Gustavo Garcia, Francisco Blanco, Kuru Ratnavelu, and Michael James Brunger. Excitation of electronic states in tetrahydrofuran by electron impact. *The Journal of chemical physics*, 134(14) :144302, 2011.
- [13] A Gaufr, LR Hargreaves, A Jo, J Tanner, MA Khakoo, T Walls, C Winstead, and V McKoy. Low-energy electron scattering by tetrahydrofuran. *Physical Review A*, 85(5) :052717, 2012.
- [14] Amar Dora, Lilianna Bryjko, Tanja van Mourik, and Jonathan Tennyson. R-matrix study of elastic and inelastic electron collisions with cytosine and thymine. *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics*, 45(17) :175203, 2012.
- [15] JR Ferraz, AS dos Santos, GLC de Souza, AI Zanelato, TRM Alves, M-T Lee, LM Brescansin, RR Lucchese, and LE Machado. Cross sections for electron scattering by formaldehyde and pyrimidine in the low-and intermediate-energy ranges. *Physical Review A*, 87(3) :032717, 2013.
- [16] JB Maljković, AR Milosavljević, F Blanco, D Šević, Gustavo García, and BP Marinković. Absolute differential cross sections for elastic scattering of electrons from pyrimidine. *Physical Review A*, 79(5) :052706, 2009.
- [17] WY Baek, MU Bug, and H Rabus. Differential elastic electron-scattering cross sections of pyrimidine in the energy range between 20 ev and 1 kev. *Physical Review A*, 89(6) :062716, 2014.
- [18] Woon Yong Baek, A Arndt, MU Bug, H Rabus, and M Wang. Total electron-scattering cross sections of pyrimidine. *Physical Review A*, 88(3) :032702, 2013.
- [19] Martina C Fuss, L Ellis-Gibblings, Darryl B Jones, MJ Brunger, Francisco Blanco, A Muñoz, Paulo Lima-Vieira, and Gustavo Garcia. The role of pyrimidine and water as underlying molecular constituents for describing radiation damage in living tissue : A comparative study. *Journal of Applied Physics*, 117(21) :214701, 2015.
- [20] H Aouchiche, F Medegga, and C Champion. Doubly differential and integral cross sections for electron elastic scattering by hydrogen sulfide. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 333 :113–119, 2014.
- [21] C Champion, H Lekadir, ME Galassi, O Fojón, RD Rivarola, and J Hanssen. Theoretical predictions for ionization cross sections of dna nucleobases impacted by light ions. *Physics in Medicine & Biology*, 55(20) :6053, 2010.
- [22] Ashok Jain. Total (elastic+ absorption) cross sections for e-ch 4 collisions in a spherical model at 0.10–500 ev. *Physical Review A*, 34(5) :3707, 1986.
- [23] Ashok Jain. Electron scattering with methane molecules at 20–500 ev. *The Journal of chemical physics*, 81(2) :724–727, 1984.

- [24] H Aouchiche, C Champion, and D Oubaziz. Electron and positron elastic scattering in gaseous and liquid water : a comparative study. *Radiation Physics and Chemistry*, 77(2) :107–114, 2008.
- [25] JB Furness and IE McCarthy. Semiphenomenological optical model for electron scattering on atoms. *Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics*, 6(11) :2280, 1973.
- [26] Marvin H Mittleman and Kenneth M Watson. Effects of the pauli principle on the scattering of high-energy electrons by atoms. *Annals of Physics*, 10(2) :268–279, 1960.
- [27] Francesc Salvat. Optical-model potential for electron and positron elastic scattering by atoms. *Physical Review A*, 68(1) :012708, 2003.
- [28] NT Padial and DW Norcross. Parameter-free model of the correlation-polarization potential for electron-molecule collisions. *Physical Review A*, 29(4) :1742, 1984.
- [29] Prasanga Palihawadana, Roisin Boadle, Luca Chiari, EK Anderson, JR Machacek, Michael J Brunger, SJ Buckman, and JP Sullivan. Positron scattering from pyrimidine. *Physical Review A*, 88(1) :012717, 2013.
- [30] Alan Hinchliffe and Humberto Soscun Machado. Density functional studies of molecular polarizabilities. 7. anthracene and phenanthrene. *International Journal of Molecular Sciences*, 1(1) :8–16, 2000.
- [31] GL Blackman, RD Brown, and FR Burden. The microwave spectrum, dipole moment, and nuclear quadrupole coupling constants of pyrimidine. *Journal of Molecular Spectroscopy*, 35(3) :444–454, 1970.
- [32] Prasanga Palihawadana, James Sullivan, Michael Brunger, Carl Winstead, Vincent McKoy, Gustavo Garcia, Francisco Blanco, and Stephen Buckman. Low-energy elastic electron interactions with pyrimidine. *Physical Review A*, 84(6) :062702, 2011.
- [33] F Medegga and H Aouchiche. Doubly differential and integral cross sections for electron elastic scattering by hydrogen chloride and hydrogen fluoride. *High Energy Chemistry*, 51(6) :462–472, 2017.
- [34] Hocine Aouchiche. Differential and integral cross sections for electron elastic scattering by ammonia for incident energies ranging from 10 ev to 20 kev. *Revista Mexicana de Física*, 64(5) :498–506, 2018.
- [35] AN Agnihotri, S Kasthurirangan, S Nandi, A Kumar, ME Galassi, RD Rivarola, O Fojón, C Champion, J Hanssen, H Lekadir, et al. Ionization of uracil in collisions with highly charged carbon and oxygen ions of energy 100 kev to 78 mev. *Physical Review A*, 85(3) :032711, 2012.
- [36] Martina C Fuss, Ana G Sanz, Francisco Blanco, Juan Carlos Oller, Paulo Lima-Vieira, Michael J Brunger, and Gustavo García. Total electron-scattering cross sections from pyrimidine as measured using a magnetically confined experimental system. *Physical Review A*, 88(4) :042702, 2013.