

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE



UNIVERSITÉ MOULOUD MAMMARI DE TIZI-OUZOU
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Laboratoire de Mécanique, Structure et Énergétiques

MEMOIRE DE MASTER

Filière : Physique
Spécialité : Nano-physique

Présenté par :
RAMDANI Sabrina

Thème

***Etude théorique de la diffusion élastique des électrons
pour des molécules d'ADN et d'ARN***

Devant le jury d'examen composé de :

Aouchiche	Hocine	Professeur	U.M.M.T.O.	Président
Boukellal	Ali	Professeur	U.M.M.T.O.	Examineur
Mokrani	Saida	Maître de conférence A	U.M.M.T.O.	Encadreur

Soutenu publiquement le : 02/10/2021

Dédicaces

À la mémoire de mon père.

À ma mère.

À ma sœur Yasmina.

À mon frère Kamel qui m'a beaucoup aidé.

À mon neveu Abdenour.

À ma sœur Dahbia.

À toute ma famille

À mes amis.

Remerciements

En premier lieu, nous remercions le bon Dieu le tout puissant qui nous a donné le courage et la volonté de mener à bon terme ce travail.

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 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 M. Aouchiche Hocine d'avoir accepté 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.

Enfin, je ne dirai jamais assez pour témoigner ma gratitude et ma profonde reconnaissance à ma mère qui m'a accompagné jour après jour, avec beaucoup de patience, durant toute la période qui m'a amené à l'aboutissement de mon projet de master 2, et pour tout le soutien et l'appui que j'ai pu trouver auprès d'elle. Je regrette tant que mon père ne soit plus parmi nous pour que je puisse partager ce moment avec lui.

Table des matières

Introduction générale.....	1
Chapitre 1 : Etude théorique sur la diffusion élastique	4
1.1 Introduction.....	4
1.2 Section efficace	4
1.3 Méthodes de calcul de la section efficace	5
1.3.1 Analyse en ondes partielles (Méthodes de déphasages)	5
1.3.1.1 En absence du potentiel (particules libre)	7
1.3.1.2 En présence du potentiel d'interaction	8
1.3.2 Approximation de Born.....	10
1.4 La densité de charge électronique	12
1.5 Les différents potentiels utilisés dans le calcul des sections efficaces différentielles.....	13
1.5.1 Potentiel optique	13
1.5.1.1 Potentiel statique	14
1.5.1.2 Potentiel d'échange	14
1.5.1.3 Potentiel de corrélation – polarisation	15
1.5.1.3.1 Potentiel de polarisation de Buckingham	15
1.5.1.3.2 Potentiel de polarisation de Padial et Nocross	16
1.6 Section efficace différentielle.....	16
1.7 Section efficace intégrale	18
1.8 Description de la cible biomoléculaire	19
Chapitre 2 : Résultats et discussions	21
2.1 Introduction	21
2.2 Densité électronique	21
2.3 Sections efficaces différentielles (SED)	22
2.3.1 Sections efficaces différentielles en fonction de l'angle de diffusion	22
2.3.1 Sections efficaces différentielles en fonction des 'énergies incidentes	28
2.4 Section efficace intégrale	31
Conclusion générale	33
Bibliographie.....	35

Introduction générale

Les interactions électron-atome et molécule jouent un rôle important dans divers domaines tels que la physique des plasmas [1], l'astrophysique [2], l'industrie alimentaire [3], radiobiologie [4, 5], chimie [6] et médecine (sonde dans les examens de radiodiagnostic comme génotoxique en radiothérapie) [7]. Un grand nombre d'expériences en physique consistent à envoyer un faisceau de particule chargée sur une cible et d'étudier les collisions qui en résultent. On distingue deux catégories de diffusion : diffusion élastique [8] et diffusion inélastique [9]. Dans le cadre de ce travail, nous sommes allés plus loin en modélisant le milieu biologique, non pas par la molécule d'eau, mais par une molécule similaire au sucre d'acide désoxyribonucléique (ADN) et d'acide ribonucléique (ARN). Notre choix est porté sur la molécule α -tétrahydrofurfurylique (THFA; $C_5H_{10}O_2$) pour ses diverses utilisations dans de nombreux domaines. Toutes les molécules et constituants cellulaires peuvent être affectés par un rayonnement. Sachant bien qu'aujourd'hui, il est clairement reconnu que le support de l'information génétique (l'acide désoxyribonucléique (ADN)) est l'entité sensible d'un organisme irradié, les dommages subit par cette molécule influencent sur le fonctionnement cellulaire tels que dans le fonctionnement normal de la cellule vivante, l'ADN subit en permanence des cassures (plusieurs milliers de lésions par jour), l'action des rayonnements peut augmenter notablement le nombre de certaines lésions. Après exposition, certaines lésions radio-induites de l'ADN peuvent entraîner des mutations. Dans certains cas, elles persistent et peuvent favoriser l'émergence de cancers après plusieurs années. Pour une population donnée, il existe un taux de cancers spontanés mais l'irradiation peut augmenter ce taux. Plusieurs travaux théoriques et expérimentaux portant sur l'interaction électronique avec les composants du squelette de l'acide désoxyribonucléique (ADN) et de l'acide ribonucléique (ARN). Notamment P Mozejko et al. [10] ont étudié la diffusion élastique des électrons par les composantes analogues au sucre désoxyribose (le tétrahydrofurane $C_4H_8O_2$, le 3-hydroxytétrahydrofurane C_4H_8O , l'alcool α -tétrahydrofurfurylique $C_5H_{10}O_2$ et l'acide phosphorique H_3PO_4) et ont reporté des sections efficaces différentielles et intégrales sur une gamme d'énergies allant de 50 eV à 2000 eV à l'aide de méthodes des atomes indépendantes (MAI) en utilisant un potentiel statique. Les mêmes auteurs ont également calculés les sections efficaces différentielles en utilisant le modèle de collision binaire sur une gamme d'énergie du seuil d'ionisation à 4000 eV pour les mêmes cibles.

Par ailleurs A.R Milosavljevic et al. [11] ont étudié théoriquement et expérimentalement la diffusion élastique des deux molécules THFA et THF dans la gamme des énergies incidentes allant de 40 eV à 300 eV et de l'angle de diffusion (30° à 90°) et ont déterminés les sections efficaces intégrales élastiques et inélastiques pour la THFA dans la plage d'énergie incidente de 5 eV à 5000 eV. De plus, W. Y. Baek et al. [12] ont calculé les sections efficaces de diffusion élastique différentielle du tétrahydrofurane pour les électrons et ils ont aussi mesurés les sections différentielles sur une gamme d'énergie de 20 eV à 1 keV pour des angles de diffusion compris entre 5° et 135°. Les mesures ont été effectuées en utilisant une disposition à faisceau croisé sans l'application de la technique de flux relatif largement utilisée. Les sections efficaces intégrales ont été déterminées pour des énergies d'électrons comprises entre 6 eV et 1 keV en utilisant une expérience de transmission linéaire distincte. Les sections efficaces différentielles du tétrahydrofurane pour la diffusion élastique des électrons ont également été calculées et mesurées dans la gamme d'énergie entre 50 eV et 1 keV en appliquant le modèle modifié aux atomes indépendants par M. G. P. Homem et al. [13]. En 2021 K.A Dubey et al. [14] ont utilisé l'analyse des ondes partielles de Dirac pour étudier la diffusion élastique des électrons de Ar z^+ et C60 z^+ ($z=1, 6$). De plus ils ont fait une analyse quantitative de la section efficace totale (TCS) et de la section efficace différentielle (DCS) pour mettre en évidence les effets de l'état de charge et de la polarisabilité de la cible. F.P Bardela et al. [15] ont utilisé toute l'expression du potentiel optique et la méthode des atomes indépendants (MAI) pour les calculs théoriques et les mesures expérimentales des sections efficaces différentielles élastique et inélastique pour le phosphate de triméthyle ($C_3H_9PO_4$) sur une gamme d'énergie de 5–800 eV pour des angles de diffusion comprise entre 10°–130°. A.R Milosavljevic et al. [16] ont mesuré les sections efficaces différentielles de diffusion élastique pour la molécule THF dans la gamme d'énergie de 20 à 300 eV et dans la gamme angulaire de 10° à 110°, les mesures ont été effectuées à l'aide d'un faisceau d'électrons croisé avec un faisceau de molécules. Zecca et al. [17] ont mesuré les sections efficaces intégrales pour le THF à des énergies incidentes de 0,1 à 21 eV de plus ont été mesurés aussi par Mozejko et al. [18] à des énergies incidentes jusqu'à 370 eV. Récemment, Colyer et al. [19] ont rapporté des sections efficaces différentielles dans la plage d'énergie de 6,5 à 50 eV couvrant la plage angulaire entre 10° et 130° et Dampc et al. [20] les ont reporté dans les plages 6-20 eV et 20°-180°.

Sur le plan théorique, plusieurs calculs pour les collisions élastiques e-THF sont disponibles dans la littérature. Trévisan et al. [21] ont rapporté des calculs des sections efficaces différentielles pour le THF et l'acide phosphorique, en utilisant une variante de la méthode de la matrice R. Plus récemment, Winstead et McKoy. [22] ont calculé les sections efficaces différentielles pour la diffusion élastique d'électrons par le désoxyribose THF, en utilisant la méthode multicanal de Schwinger, ces calculs sont en très bon accord avec les données expérimentales de Colyer et al. [19], Dampe et al. [20] et Allan et al. [23] pour les énergies incidentes inférieures à 20 eV. Les sections efficaces intégrales, à la fois élastiques et inélastiques ont été calculées pour le THF par Bouchiha et al. [24] en utilisant la méthode de la matrice R, à des énergies de collision de 1 à 10 eV.

Dans le premier chapitre nous allons donner quelques généralités sur la théorie de diffusion élastique (méthodes de déphasages et approximation de Born). Nous avons donc défini l'amplitude de diffusion qui est indispensable pour la détermination des sections efficaces différentielles et intégrales. Ensuite on a présenté la cible choisie dans notre étude qui est α -tétrahydrofurfurylique (THFA; $C_5H_{10}O_2$). Le deuxième chapitre est consacré aux calculs des sections efficaces différentielles et intégrales de diffusion élastique d'électrons en fonction de l'angle de diffusion et celles obtenues en fonction de l'énergie incidentes afin de montrer les différents phénomènes physiques tel que : échange, corrélation-polarisation, interaction inter-atomique, diffusion multiple,... Enfin on termine par une conclusion où les points les plus importants sont consignés.

Chapitre 1

Etude théorique sur la diffusion élastique

1.1 Introduction

Un grand nombre d'expérience en physique consiste à envoyer un faisceau de particules chargées sur une cible atomique ou moléculaire et d'étudier les collisions qui en résultent. Ces collisions peuvent être divisées en deux grandes catégories, le premier type consiste en la diffusion inélastique au cours de laquelle une quantité de l'énergie incidente va être cédée à la cible, tandis qu'elle passe dans un état excité durant la collision et le deuxième type consiste en la diffusion élastique, dont la structure interne de la cible reste inchangée, de plus l'énergie des deux particules incidentes et diffusées est la même, quand à la direction de propagation elle est différente. Dans notre travail, on s'intéresse uniquement au cas de la diffusion élastique. Les résultats de mesures de la diffusion élastique s'expriment au moyen de quantité appelée sections efficaces reliées directement au comportement asymptotique des solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger. Tenant compte des potentiels d'interactions, la résolution exacte de cette dernière est pratiquement impossible. Ainsi, des méthodes telles que les développements en ondes partielles et l'approximation de Born sont souvent utilisées.

1.2 Section efficace

La notion de section efficace est très importante dans l'étude de diffusion élastique et inélastique, c'est une grandeur physique liée à la probabilité d'interaction entre deux particules dans une réaction donnée, en particulier, entre les particules incidentes et la cible atomique ou moléculaire. On considère un flux Φ de particules incidentes de direction parallèle à l'axe (oz) qui est dirigé vers une cible de particules N_i . On dispose d'un détecteur D qui mesure le nombre de particules diffusées par unité de temps dans l'angle solide $d\Omega$ centrée autour de la direction d'angle polaire θ et φ .

Le nombre de particules détectés N est proportionnel au nombre d'atomes cibles N_i et aux flux incident ϕ par un coefficient σ :

$$N = \sigma \Phi N_i \quad (1.1)$$

La grandeur σ est la section efficace de diffusion, elle est homogène à une surface et elle est exprimée en barn ($1b=10^{-24}cm^2$).

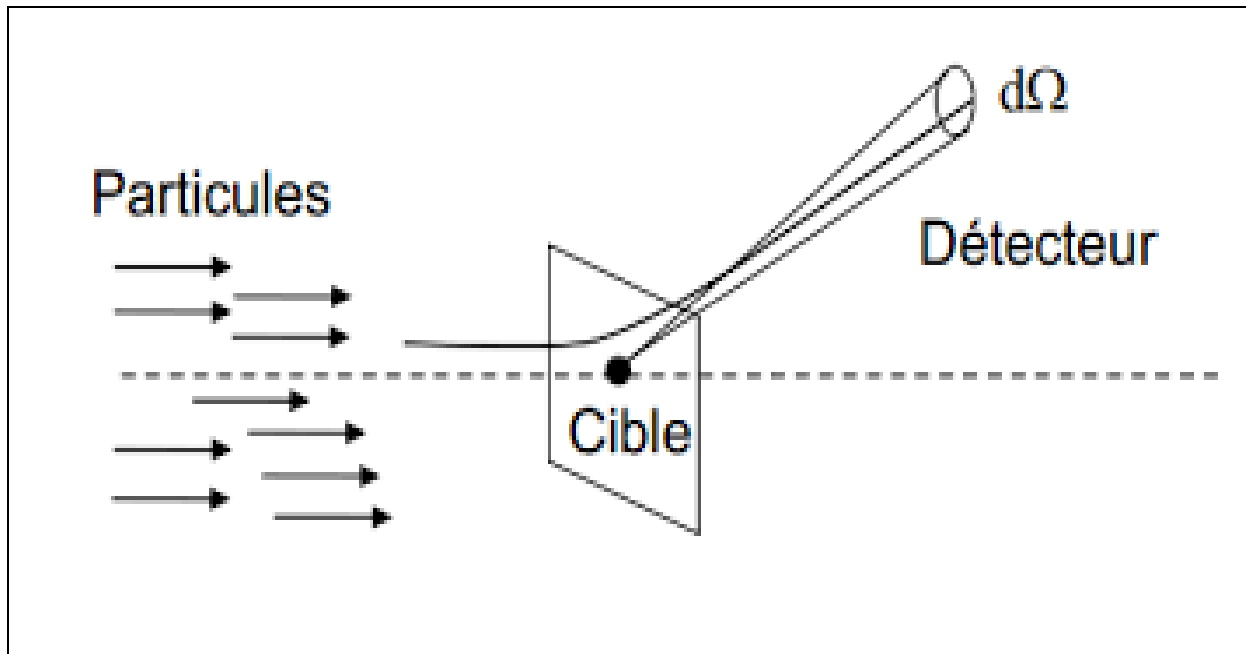


Figure 1.1 - Diffusion d'un faisceau de particules par une cible

1.3 Méthodes de calcul de la section efficace

Afin de calculer les sections efficaces, on peut utiliser deux méthodes différentes selon l'énergie des particules incidentes. Dans le cas d'une énergie incidente élevée, la collision avec la particule cible n'est qu'une simple perturbation, dans ce cas le calcul se fait dans le cadre de l'approximation de Born. D'autre part pour les basses énergies incidentes cette approximation n'est plus valide, donc les sections efficaces sont calculées par la méthode de déphasage qui est basée sur des développements en ondes partielles.

1.3.1 Analyse en ondes partielles (Méthode de déphasage)

Dans ce cas, on traite la diffusion d'une particule par un potentiel central. On va déterminer le comportement asymptotique de la fonction d'onde de diffusion qui est la solution de l'équation de Schrödinger. Alors pour calculer la section efficace, il faut déterminer la solution de l'équation de Schrödinger, cette dernière est définie comme suit :

$$H\psi_{n,l,m}(\vec{r}) = E\psi_{n,l,m}(\vec{r}) \quad (1.2)$$

$\psi_{n,l,m}$ est la fonction d'onde, qui peut être décomposée en une partie radiale $R_{n,l}(r)$ et une partie angulaire $Y_l^m(\theta, \varphi)$:

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (1.3)$$

Avec H est l'hamiltonien $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)$

En injectant l'expression précédente dans l'équation (1.2) on obtient :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + (V(r)) \right] R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) = ER_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (1.4)$$

Où Δ le Laplacien définie par :

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\vec{L}^2}{\hbar^2 r^2} \quad (1.5)$$

Et \vec{L} le moment cinétique orbital.

On remplace l'opérateur Laplacien par son expression dans l'équation (1.4) on obtient :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + V(r) \right] R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) = ER_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (1.6)$$

Où les $Y_l^m(\theta, \varphi)$ sont les harmoniques sphériques :

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{+im\varphi} \quad (1.7)$$

La fonction $R_{n,l}(r)$ est une constante pour l'opérateur différentiel, en faisant agir \vec{L}^2 sur ses états propres Y_l^m et après simplification, il reste l'équation dite radiale pour la seule fonction $R_{n,l}(r)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r R_{n,l}(r) \right] + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R_{n,l}(r) + V(r) R_{n,l}(r) = ER_{n,l}(r) \quad (1.8)$$

Il est souvent avantageux d'introduire une autre fonction inconnue $u_{n,l}(r) = r R_{n,l}(r)$: par substitution dans l'équation précédente, on voit que $u_{n,l}(r)$ satisfait l'équation suivante :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_{n,l}(r)}{dr^2} + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right) u_{n,l}(r) = E u_{n,l}(r) \quad (1.9)$$

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

On pose $U(r) = V(r) \frac{2m}{\hbar^2}$ et $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, l'équation précédente s'écrit :

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) + k^2 \right) u_{n,l}(r) = 0 \quad (1.10)$$

1.3.1.1 En absence du potentiel (particules libre)

En l'absence de potentiel l'équation radiale (1.10) devient :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] u_{n,l}^{(0)}(r) = 0 \quad (1.11)$$

Où la solution de $u_{n,l}^{(0)}(r)$ s'écrit :

$$u_{n,l}^{(0)}(r) \frac{1}{r} = R_{n,l}(r) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} j_l(kr) \quad (1.12)$$

Où $j_l(kr)$ est la fonction de Bessel sphérique définie par :

$$j_l(kr) = (-1)^l (kr)^l \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \frac{\sin kr}{kr} \quad (1.13)$$

Cette équation a pour comportement asymptotique la forme suivante :

$$j_l(kr)_{r \rightarrow \infty} \sim \frac{1}{kr} \sin \left(Kr - \frac{l\pi}{2} \right) \quad (1.14)$$

En utilisant les propriétés trigonométriques de la fonction sinus, on aura :

$$j_l(kr)_{r \rightarrow \infty} \sim \sum_{l=0}^{\infty} -\frac{1}{kr} \frac{\left(e^{-ikr} e^{i\frac{l\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-i\frac{l\pi}{2}} \right)}{2i} \quad (1.15)$$

En injectant cette expression dans l'équation (1.3) en tenant compte de l'équation (1.12) on obtient :

$$\psi_{n,l,m}^{(0)}(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} -\sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} \frac{1}{kr} \left(\frac{e^{-ikr} e^{i\frac{l\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-i\frac{l\pi}{2}}}{2i} \right) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (1.16)$$

D'après l'équation précédente, on constate qu'à l'infini la fonction d'onde $\psi_{n,l,m}^{(0)}(r, \theta, \varphi)$ est une superposition d'une onde entrante $\frac{e^{-ikr}}{r}$ et d'une onde sortante $\frac{e^{ikr}}{r}$ dont les amplitudes présentes une différence de phase égale $l\pi$.

1.3.1.2 En présence du potentiel d'interaction

Lorsque r tend vers l'infini, le terme centrifuge $\frac{l(l+1)}{r^2}$ devient négligeable, le potentiel étant à portée finie devient nul aussi, l'équation (1.10) s'écrit :

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2\right)u_{n,l}(r) = 0 \quad (1.17)$$

Où la fonction radiale $u_{n,l}(r)$ a pour forme asymptotique définie par cette équation :

$$u_{n,l}(r) \frac{1}{r} = R_{n,l}(r) \sim \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \quad (1.18)$$

De toute évidence, le déphasage δ_l contient l'image de potentiel, qui dépend de l'énergie d'onde partielle par rapport à l'onde sphérique libre, ce déphasage résume tout l'effet du potentiel central. On remplace l'équation précédente (1.18) dans l'équation (1.3) on obtient :

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (1.19)$$

En utilisant la transformation trigonométrique, la fonction d'onde s'écrit sous la forme suivante :

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{kr} \left(\frac{e^{-ikr} e^{i(l\frac{\pi}{2} - \delta_l)} - e^{ikr} e^{-i(l\frac{\pi}{2} - \delta_l)}}{2i} \right) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (1.20)$$

Selon l'équation précédente (1.20), l'onde partielle $\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$ résulte de la superposition d'une onde entrante et d'une onde sortante. Pour exprimer la comparaison entre l'onde partielle et onde sphérique libre, on peut modifier l'onde entrante de (1.20) de façon qu'elle soit identique à celle de (1.16). Pour cela on définit une nouvelle onde partielle $\check{\psi}_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$ qui égal :

$$\check{\psi}_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = e^{i\delta_l} \psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) \quad (1.21)$$

On remplace l'expression de $\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$ dans l'équation précédente, on aura :

$$\check{\psi}_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} -\frac{1}{kr} \left(\frac{e^{-ikr} e^{i\frac{l\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-i\frac{l\pi}{2}} e^{2i\delta_l}}{2i} \right) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (1.22)$$

L'onde partielle apparait comme la superposition d'une onde entrante e^{-ikr} qui est la même que dans le cas de l'onde sphérique libre et d'une onde sortante déphasée de $2\delta_l$ par rapport à l'onde sortante libre. Noter que toute dépendance en φ disparaît puisque $v(r)$ est une symétrie sphérique, ce qui permet de remplacer les harmoniques sphériques Y_l^0 par le polynôme de Legendre. L'analyse en ondes partielles consiste à inspirer du développement d'une onde plane en onde sphérique [25]:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(kr) Y_l^0(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (1.23)$$

Le facteur $e^{2i\delta_l}$ donné dans l'équation (1.22) s'écrit comme suit :

$$e^{2i\delta_l} = 1 + 2i e^{i\delta_l} \sin \delta_l \quad (1.24)$$

En multipliant l'équation (1.22) par $\sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)}$ et en remplaçant le facteur $e^{2i\delta_l}$ par son expression (1.24) on obtient :

$$\check{\psi}_{n,l,0}(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} -a_l \left[\left(\frac{e^{-ikr} e^{i\frac{l\pi}{2}} - e^{ikr} e^{-i\frac{l\pi}{2}}}{2ikr} \right) - \frac{e^{ikr}}{r} \frac{1}{k} e^{-i\frac{l\pi}{2}} e^{i\delta_l} \sin(\delta_l) \right] \quad (1.25)$$

Avec :

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

Le premier terme de l'équation (1.25) correspond au développement asymptotique de l'onde plane e^{ikz} , donc la fonction d'onde $\check{\psi}_{n,l,0}(r, \theta)$ s'écrit sous la forme suivante [25]:

$$\check{\psi}_{n,l,0}(r, \theta) = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (1.26)$$

L'identification des expressions (1.25) et (1.26) permet de trouver l'expression de l'amplitude de diffusion $f(\theta)$ qui s'écrit comme suit :

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_l \sqrt{4\pi(2l+1)} e^{i\delta_l} \sin(\delta_l) Y_l^0(\theta) \quad (1.27)$$

Comme la section efficace est donnée par le carré de l'amplitude de diffusion donc on a [25] :

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \left| \frac{1}{k} \sum_l \sqrt{4\pi(2l+1)} e^{i\delta_l} \sin(\delta_l) Y_l^0(\theta) \right|^2 \quad (1.28)$$

1.3.2 Approximation de Born

L'approximation de Born est l'une des approximations les plus utilisées pour le calcul des sections efficaces élastique [26] et inélastique [27]. Cette approximation consiste à chercher la solution de l'équation intégrale de la diffusion, en supposant que le potentiel diffuseur est traité comme une perturbation, les particules incidentes et diffusées sont représentées par des fonctions d'onde plane. Pour cela on considère l'équation de Schrödinger qui s'écrit comme suit [28] :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] \psi_k(\vec{r}) = E \psi_k(\vec{r}) \quad (1.29)$$

Où \hbar est la constante de Planck, \vec{k} le vecteur d'onde, m la masse de la particule incidente et E l'énergie d'un projectile qui est la même avant et après la collision puisque la collision est élastique.

$$(\Delta + k^2 - U(r)) \psi_k(\vec{r}) = 0 \quad (1.30)$$

Avec : $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ est relié à l'énergie incidente et $U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r)$ l'énergie potentielle.

Alors la solution $\psi_k(r)$ de l'équation de Schrödinger est une onde stationnaire de diffusion qui peut s'écrire sous la forme suivante [28] :

$$\psi_k^{diff}(\vec{r}) = \psi^0(\vec{r}) + \int d^3 \vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \psi_k^{diff}(\vec{r}') \quad (1.31)$$

Où $G(\vec{r} - \vec{r}')$ fonction de Green est donnée par :

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (1.32)$$

La forme asymptotique, pour r tend vers l'infini est définie par cette équation :

$$G(\vec{r} - \vec{r}') \approx -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{i\vec{k}_d \vec{r}}}{r} e^{-i\vec{k}_d \vec{r}'} \quad (1.33)$$

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

Telle que :

$$\psi^0(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i \vec{r}} \quad (1.34)$$

La fonction d'onde stationnaire de diffusion devient :

$$\psi_k^{diff}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i \vec{r}} + \int d^3 r G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \psi_k^{diff}(\vec{r}') \quad (1.35)$$

En faisant un changement de $\vec{r} \rightarrow \vec{r}'$ et $\vec{r}' \rightarrow \vec{r}''$, donc l'équation (1.35) devient :

$$\psi_k^{diff}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i \vec{r}'} + \int d^3 \vec{r} G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \psi_k^{diff}(\vec{r}') \quad (1.36)$$

En injectant l'expression (1.36) dans (1.35) on obtient :

$$\psi_k^{diff}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i \vec{r}} + \int d^3 \vec{r} G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \left[e^{i\vec{k}_i \vec{r}'} + \int d^3 \vec{r} G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \psi_k^{diff}(\vec{r}') \right]$$

$$\begin{aligned} \psi_k^{diff}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i \vec{r}} + \int d^3 \vec{r} G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') e^{i\vec{k}_i \vec{r}'} + \int d^3 \vec{r} G(\vec{r} \\ - \vec{r}') U(\vec{r}') \times \int d^3 \vec{r} G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \psi_k^{diff}(\vec{r}') \end{aligned} \quad (1.37)$$

Si le potentiel d'interaction est faible, le deuxième terme du second membre est de plus en plus petit donc on pourra le négliger devant le premier, en remplaçant l'expression (1.33) dans l'expression (1.37) on obtient :

$$\psi_k^{diff}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i \vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{i\vec{k}_i \vec{r}}}{r} \int e^{-i\vec{k}_d \vec{r}'} U(\vec{r}') e^{i\vec{k}_i \vec{r}'} d^3 \vec{r}' \quad (1.38)$$

On pose 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, donc l'expression (1.38) devient :

$$\psi_k^{diff}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i \vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{i\vec{k}_i \vec{r}}}{r} \int e^{-i\vec{k} \vec{r}'} U(\vec{r}') d^3 \vec{r}' \quad (1.39)$$

L'identification des deux expressions (1.39) et (1.26) on aboutit à l'expression de $f(\theta)$ [28]

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\vec{k} \vec{r}'} U(\vec{r}') d^3 \vec{r}' \quad (1.40)$$

La section efficace de diffusion est donc simplement reliée, dans l'approximation de Born à la transformée de Fourier du potentiel; en effet, si l'on utilise (1.40), (1.28) et l'expression de potentiel $V(r)$ on obtient :

$$\sigma(\theta, \varphi) = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \int d^3 r e^{-i\vec{k} \vec{r}} V(r) \right|^2 \quad (1.41)$$

1.4 La densité de charge électronique

La densité de charge électronique est calculée à partir des fonctions d'onde atomique de type Slater par la méthode CNDO pour chaque atome de la molécule cible, la fonction d'onde s'écrit :

$$\psi_j(\vec{r}) = \sum_{k=1}^{N_j} a_{jk} \Phi_{n_{jk}l_{jk}m_{jk}}^{\xi_{jk}}(\vec{r}) \quad (1.42)$$

Où $\psi_j(\vec{r})$ est la fonction d'onde moléculaire associée à l'orbitale j , N_j est le nombre de fonctions de Slater utilisées pour construire l'orbitale moléculaire j , a_{ij} le poids statique de chaque composante atomique. La fonction d'onde $\Phi_{n_{jk}l_{jk}m_{jk}}^{\xi_{jk}}(\vec{r})$ s'écrit sous la forme d'un produit d'une fonction radiale $R_{n_{jk}}^{\xi_{jk}}(r)$ et une partie angulaire $S_{l_{jk},m_{jk}}(\hat{r})$:

$$\Phi_{n_{jk}l_{jk}m_{jk}}^{\xi_{jk}}(\vec{r}) = R_{n_{jk}}^{\xi_{jk}}(r) S_{l_{jk},m_{jk}}(\hat{r}) \quad (1.43)$$

Où \hat{r} est l'angle solide de vecteur position \vec{r} et la partie radiale $R_{n_{jk}}^{\xi_{jk}}(r)$ est exprimée par des fonctions de Slater suivantes [29] :

$$R_{n_{jk}}^{\xi_{jk}}(r) = \frac{(2\xi_{jk})^{n_{jk} + \frac{1}{2}}}{\sqrt{2n_{jk}!}} r^{n_{jk}-1} e^{-\xi_{jk}r} \quad (1.44)$$

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

$$\begin{cases} S_{l_{jk},m_{jk}}(\hat{r}) = \left[\frac{m_{jk}}{2|m_{jk}|} \right]^{\frac{1}{2}} \left\{ Y_{l_{jk},-|m_{jk}|}(\hat{r}) + (-1)^{m_{jk}} \left[\frac{m_{jk}}{|m_{jk}|} \right] Y_{l_{jk},|m_{jk}|}(\hat{r}) \right\} & \text{si } m_{jk} \neq 0 \\ S_{l_{jk},0}(\hat{r}) = Y_{l_{jk},0}(\hat{r}) & \text{si } m_{jk} = 0 \end{cases} \quad (1.45)$$

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

$$\rho_j(\vec{r}) = \sum_{k=1}^{N_j} |R_{n_{jk}}(\vec{r})|^2 \quad (1.46)$$

Avec N_j est le nombre d'atome de la molécule cible.

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

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{j=1}^N \rho_j(\vec{r}) \quad (1.47)$$

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

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

Après avoir rappelé les deux méthodes utilisées pour la résolution de l'équation de Schrödinger et la densité de charge électronique, nous allons décrire brièvement les potentiels utilisées dans le calcul des sections efficaces différentielles.

1.5.1 Potentiel optique

Le potentiel utilisé dans ce travail est le potentiel optique qui est important à l'étude des interactions entre particules chargées incidentes et la cible moléculaire. Ce potentiel permet de traiter la diffusion élastique des électrons par des cibles sphériques ou non sphériques. Son expression est donnée par :

$$V_{opt}(r) = V_R(r) + iV_{abs}(r) \quad (1.48)$$

Avec $V_R(r)$ et $V_{abs}(r)$ représentent les potentiels de diffusion élastique et la diffusion inélastique respectivement. De plus dans notre travail on s'intéresse à la partie réelle du potentiel optique qui est donnée comme suit :

$$V_R(r) = V_{st}(r) + V_e(r) + V_{cp}(r) \quad (1.49)$$

Avec $V_{st}(r)$ est le potentiel statique, $V_e(r)$ est le potentiel d'échange et $V_{cp}(r)$ est le potentiel de corrélation-polarisation. 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.

1.5.1.1 Potentiel statique

Le potentiel d'interaction électrostatique caractérise l'interaction entre le projectile et la cible atomique ou moléculaire. Ce potentiel est la somme de deux contributions ; l'expression de ce potentiel est donnée par [26] :

$$V_{st}(r) = \sum_{j=1}^N \left([V_j(r)]_{elec} + [V_j(r)]_{ion} \right) \quad (1.50)$$

Avec N est le nombre d'atomes de la molécule cible et $[V_j(r)]_{elec}$ est la contribution électronique qui est donnée par :

$$[V_j(r)]_{elec} = \sum_{i=1}^{Norb} Z_i \sum_{k,k'=1}^{N_j} a_{jk} a_{jk'} \delta(m_{jk} - m_{jk'}) \delta(l_{jk} - l_{jk'}) \int_0^{\infty} R_{n_{jk}l_{jk}}^{\zeta_{jk}}(r') \frac{r'^2}{r^{>}} R_{n_{jk}l_{jk'}}^{\zeta_{jk}}(r) dr \quad (1.51)$$

Avec Z_i est le nombre d'électron pour chaque atome de la molécule cible, Norb est le nombre d'orbitales atomiques et $r^{>} = \max(r, r')$, tandis que $R_{n_{jk}l_{jk}}^{\zeta_{jk}}$ est la partie radiale.

Quand à $[V_j(r)]_{ion}$ est la contribution ionique qui s'écrit sous la forme suivante :

$$[V_j(r)]_{ion} = -\frac{Z_i}{r_j} \quad (1.52)$$

D'où r_j est la distance entre les noyaux des atomes constituant la molécule cible.

1.5.1.2 Potentiel d'échange

Au cours d'une diffusion d'électrons par une molécule cible, il est probable que l'électron incident peut prendre la place d'un autre électron éjecté de la cible. Mais nous ne pouvons pas prédire, puisque les électrons sont indiscernables. Pour décrire ce phénomène physique on introduit un potentiel d'échange qui a été utilisée pour le calcul des sections efficaces à basse énergie et qui dépend de l'énergie incidente E de l'électron, son expression est donnée par MC carty [30] :

$$V_{e,FM}(r) = \frac{1}{2} \left(E_D - \sqrt{E_D^2 + 4\pi\rho(r)} \right) \quad (1.53)$$

Où $E_D = E - V_{st}(r)$, E étant l'énergie de l'électron incident et V_{st} est le potentiel statique.

1.5.1.3 Potentiel de corrélation – polarisation

Le potentiel de corrélation-polarisation [7], [31-32] est composé de deux phénomènes physiques essentiels qui sont le potentiel de corrélation $V_{cor}(r)$ qui traduit l'interférence entre le nuage électronique de la molécule cible et le projectile; tandis que le potentiel de polarisation $V_{pol}(r)$ dû aux électrons créent un moment dipolaire dans le nuage électronique de la cible. On définit un rayon r_{cr} pour lequel les deux potentiels se croisent [7].

$$V_{cp}(r) = \begin{cases} \max\{V_c(r), V_p(r)\} & \text{si } r < r_{cr} \\ V_p(r) & \text{si } r > r_{cr} \end{cases} \quad (1.54)$$

En effet il existe plusieurs types de potentiel du corrélation-polarisation et parmi ce que nous utilisons dans notre travaille, on cite :

1.5.1.3.1 Potentiel de polarisation de Buckingham

Pour décrire les effets de polarisation, nous avons utilisé un potentiel du type Buckingham.

$$V_{p,B}(r) = -\frac{\alpha_d}{2(r^2 + d^2)^2} \quad (1.55)$$

Où α_d est la polarisabilité moyenne de la molécule quant au paramètre d, il est introduit pour empêche la divergence du potentiel au point $r = 0$, ce dernier est donné par Mittleman et Watson [33] sous la forme :

$$d = \left(\frac{1}{2} \alpha_d Z^{-\frac{1}{3}} b_{pol}^2 \right)^{\frac{1}{4}} \quad (1.56)$$

Où b_{pol} est un paramètre ajustable dépendant de l'énergie incidente du projectile, son expression est proposée par Salvat et al [34] comme suit :

$$b_{pol} = \left\{ \max \left[\frac{(E_i - 50(eV))}{16(eV)}; 1 \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (1.57)$$

Ce dernier terme est développé par Aouchiche et al. [26] sous cette forme :

$$b_{pol} = \left\{ \max \left[\frac{(E_i - 0.5(eV))}{0.01(eV)}; 1 \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (1.58)$$

1.5.1.3.2 Potentiel de corrélation de Padial et Nocross

Le potentiel que nous proposons pour décrire les effets physiques de corrélations est celle de Padial et Nocross [35], ce dernier dépend uniquement de paramètre r_s . Padial et Nocross [35] proposent trois expressions différentes pour ce potentiel.

$$\begin{cases} V_{cor}(r_s) = 0.0311 \log(r_s) + 0.006r_s \log(r_s) - 0.015r_s - 0.058 & \text{si } r_s \leq 0.7 \\ V_{cor}(r_s) = -0.07356 + 0.02224 \log(r_s) & \text{si } 0.7 \leq r_s \leq 10 \\ V_{cor}(r_s) = \frac{-0.584}{r_s} + 1.988(r_s)^{-3/2} - 2.450r_s^{-2} - 0.733r_s^{-5/2} & \text{si } r_s \geq 10 \end{cases} \quad (1.59)$$

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

$$r_s = (3/4\pi\rho(r))^{1/3} \quad (1.60)$$

Nous savons maintenant calculer la section efficace de diffusion à basse énergie (méthode de déphasage où onde partielle) et à haute énergie (approximation de Born) et nous connaissons les différents potentiels interactions utilisés pour ce calcul, nous devons maintenant calculer la section efficace différentielle.

1.6 Section efficace différentielle

Les collisions entre les particules sont caractérisées par la section efficace différentielle qui est définie comme le rapport du nombre de particules diffusées dans la direction (θ, φ) par unité de temps et par unité d'angle solide divisé par le flux incident, la section efficace différentielle peut apporter des informations sur le potentiel d'interaction entre la particule chargée incidente et la cible atomique ou moléculaire et permet d'obtenir des renseignements sur la structure interne de cette dernière.

Dans notre travail ; la section efficace différentielle est la somme des différentes contributions dues aux différents potentiels intervenants entre la particule chargée incidente et la cible moléculaire. Son expression est donnée comme suit:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = I_S + I_L + I_{LS} + I_{SS} + I_{SD}^{(1)} + I_{DD}^{(0)} \quad (1.61)$$

En faisant intervenir le potentiel statique dans l'équation de Schrödinger, on obtient f_i l'amplitude de diffusion de l'atome i qui est donnée par l'expression (1.28), le module carré de cette amplitude donne le premier terme I_s de l'équation (1.61) qu'on définit comme suit :

$$I_s = \sum_{i=1}^N |f_i|^2 \quad (1.62)$$

En faisant intervenir le potentiel de corrélation-polarisation V_{cp} et le potentiel d'échange V_{ex} dans l'équation (1.9) on obtient f_L . Le module carré de f_L donne le second terme de l'équation (1.61) qui s'écrit sous cette forme :

$$I_L = \sum_{i=1}^N |f_L|^2 \quad (1.63)$$

La prise en compte de l'interférence entre les deux potentiels à court distance et à longue distance donne le terme I_{LS} de l'équation (1.61) qui s'écrit sous la forme suivante:

$$I_{LS} = 2|f_L| \sum_{i=1}^N |f_i| \cos(\eta_L - \eta_i) \sin(kR_i)/kR_i \quad (1.64)$$

η_L et η_i représentent respectivement les phases des amplitudes de diffusion f_L et f_i . η est défini comme suit :

$$f = |f|e^{-i\eta} \quad (1.65)$$

R_i est la position de l'atome i et k est le module de moment du transfert ($k = 2k_i \sin \frac{\theta}{2}$; k_i est le nombre d'onde des électrons incidents).

En tenant compte des interactions entre atomes au sein de la molécule cible on obtient alors le terme I_{SS} de l'équation (1.61):

$$I_{SS} = \sum_{i \neq j}^N f_i^* f_j \sin(kR_{ij})/kR_{ij} \quad (1.66)$$

f_i et f_j sont respectivement les amplitudes de diffusion des atomes i et j ainsi R_{ij} est la distance inter-atomique.

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 terme $I_{SD}^{(1)}$ de l'équation (1.61) qui s'écrit comme suit :

$$I_{SD}^{(1)} = \frac{i}{k_i} \sum_{i \neq j}^N (f_i + f_j)^* \sum_{l_1 l_2 l_3} (2l_1 + 1)(2l_2 + 1)(2l_3 + 1) \quad (1.67)$$

$$\times \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 P_{l_2}(\cos \theta) j_{l_3}^2(k_i R_{ij}) A_{l_1}(k_i, j) A_{l_2}(k_i, i)$$

a

Avec l_1 et l_2 les moments cinétiques.

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

$$I_{DD}^{(0)} = \frac{\pi}{k_i^2} \sum_{i \neq j}^N \sum_{l_3} (2l_3 + 1) j_{l_3}^3(k_i R_{ij})$$

$$\times \sum_{m_3} \left| \sum_{l_1 l_2} (2l_1 + 1)(2l_2 + 1)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right. \quad (1.68)$$

$$\left. \times \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & -m_3 & m_3 \end{pmatrix} Y_{l_2}^{-m_3}(\theta, 0) A_{l_1}(k_i, j) A_{l_2}(k_i, i) \right|^2$$

Avec $A_l(k_i, i)$ défini comme :

$$A_l(k_i, i) = e^{i\delta_l^{(i)}} \sin \delta_l^{(i)} \quad (1.69)$$

$j_l(x)$ est la fonction sphérique de Bessel d'ordre n et $\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ le symbole 3J de Wigner.

1.7 Section efficace intégrale

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

$$\sigma = \int \frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} \sin \theta d\theta \quad (1.69)$$

1.8 Description de la cible biomoléculaire

L'alcool α -tétrahydrofurfurylique (THFA) est un composé organique de formule chimique $C_5H_{10}O_2$, (voir la figure 1.2). Cette molécule est similaire au sucre d'ADN et d'ARN. Alors que dans les squelettes des chaînes d'ADN et d'ARN, le THFA est un sucre reliant les groupes phosphate, souvent utilisés pour modéliser le cycle désoxyribose et le ribose d'ARN (voir la figure 1.3). Cette molécule contient 56 électrons, 28 orbitales moléculaires et trois types d'orbitales atomiques voir le tableau (1.1). Le choix de cette molécule est dû à son implication dans divers domaines tels que les résines vinyliques (matériaux utilisés dans le domaine de la santé dentaire pour les prothèses mobiles). THFA est utilisé comme intermédiaire chimique dans l'industrie pharmaceutique comme activateur d'absorption à diverses lotions et médicaments transdermiques (pommade, crème...) de plus la molécule THFA est un solvant utilisé dans divers produits de nettoyage, traitement de surface (décapant), dans les teintures, finitions des textiles, colorants pour cuir, caoutchouc et nylon mais aussi des dissolvants pour vernis à ongles. Il est actuellement considéré au niveau européen comme irritant pour les yeux.

No Atome	Configuration Electronique
C 1	1S(1.99)2S(1.03)2p(3.06)
O 2	1S(1.99)2S(1.66)2p(4.93)
C 3	1S(1.99)2S(0.98)2p(2.95)
C 4	1S(1.99)2S(1.02)2p(3.46)
C 5	1S(1.99)2S(1.02)2p(3.46)
H 6	1S(0.80)
H 7	1S(0.78)
H 8	1S(0.78)
C 9	1S(1.99)2S(1.02)2p(3.06)
H 10	1S(0.74)
H 11	1S(0.77)
H 12	1S(0.76)
H 13	1S(0.76)
O 14	1S(1.99)2S(1.69)2p(5.06)
H 15	1S(0.55)
H 16	1S(0.81)
H 17	1S(0.80)

Tableau 1.1 : Occupations naturelles des orbitales atomiques pour la molécule $C_5H_{10}O_2$

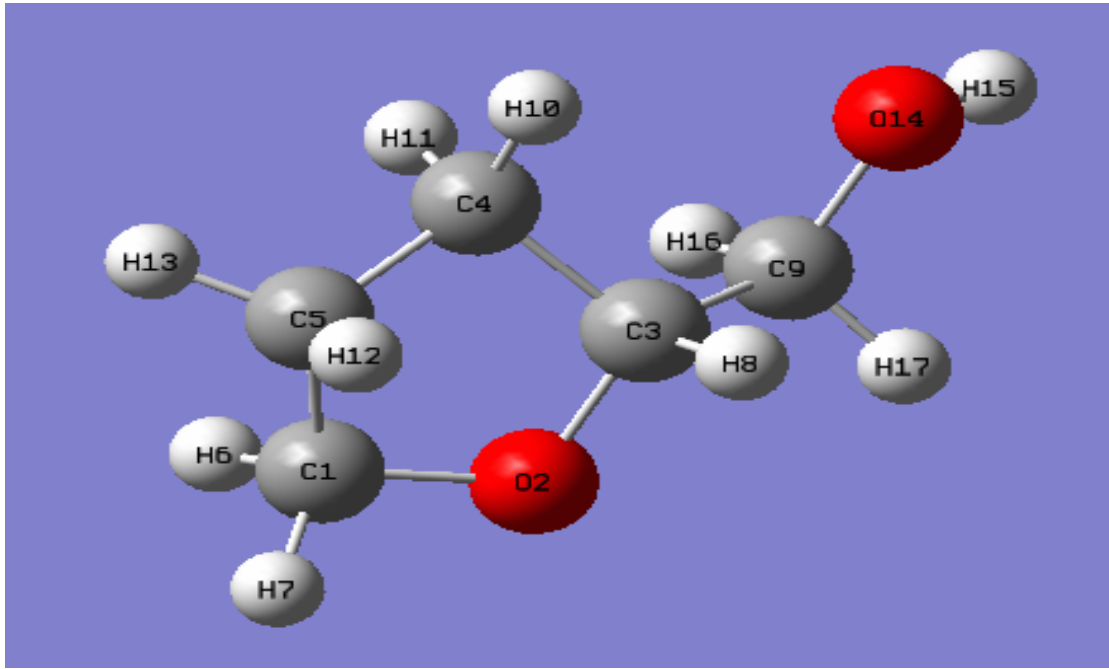


Figure 1.2 - Structure chimique de la molécule $C_5H_{10}O_2$ (THFA)

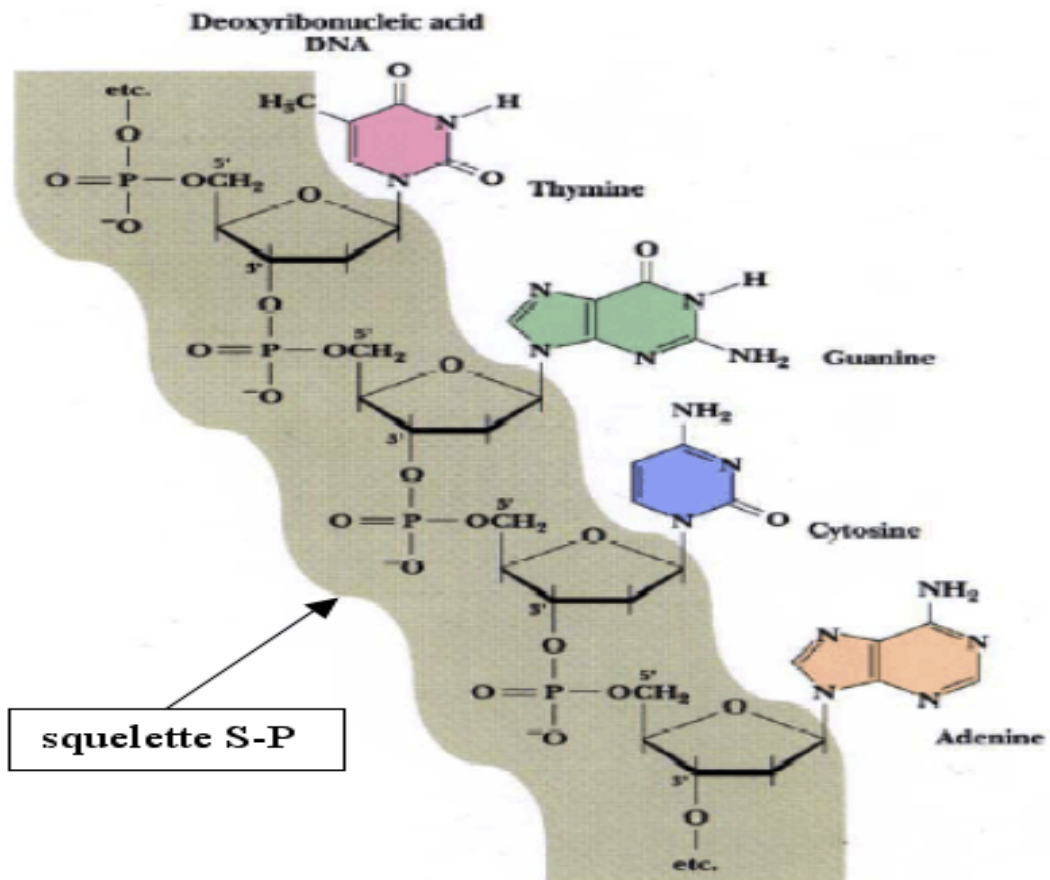


Figure 1.3 - structure de bras d'ADN

Chapitre 2

Résultats et discussions

2.1 Introductions

Dans ce chapitre, nous avons calculé les sections efficaces différentielles et intégrale de diffusion élastique obtenues par impact d'électrons sur la molécule α -tétrahydrofurfurylique (THFA; $C_5H_{10}O_2$). Cette présente étude peut être décomposée en trois parties : la première concerne l'étude des sections efficaces différentielles de la diffusion élastique de la cible THFA en fonction de l'angle de diffusion. La seconde partie est réservée à l'étude des sections efficaces différentielles en fonction de l'énergie incidente de projectile et la dernière partie est consacrée à l'étude des sections efficaces intégrales de la diffusion élastique par impact d'électrons.

2.2 Densité électronique

La figure ci-dessous représente la distribution de charge électronique de la molécule α -tétrahydrofurfurylique (THFA; $C_5H_{10}O_2$) en fonction de la distance radiale.

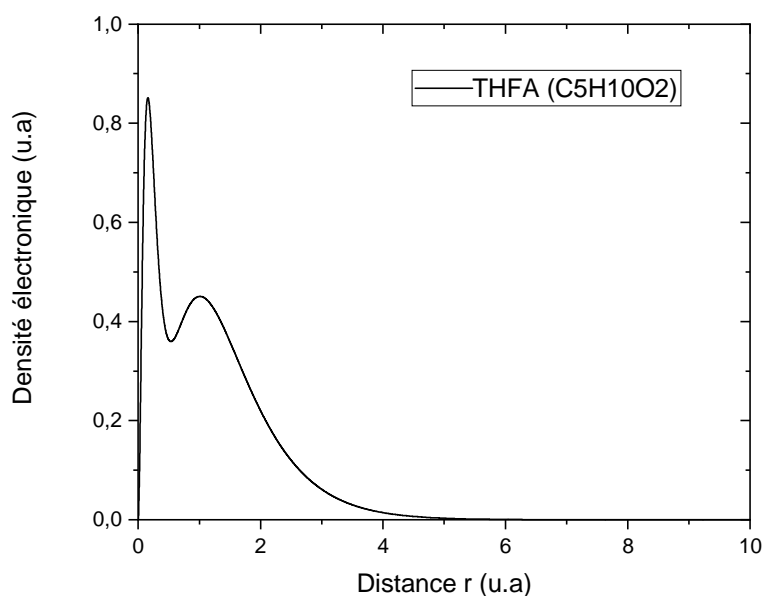


Figure 2.1 - Densité de charge électronique $\rho(r)$ en fonction de la distance radiale r .

D'après cette figure on remarque que la distribution présente deux maximums situés autour de $r = 0.16$ u.a et $r = 1.01$ u.a ce qui montre l'existence d'une accumulation de charge et un minimum autour de $r = 0.51$ u.a. La distribution ne montre aucune valeur significative sur la distance radiale $r \geq 5$ u.a, la densité devient quasiment nulle et prend la forme d'une asymptote.

2.3 Sections efficaces différentielles (SED)

Les différentes figures ((2.2), (2.3), (2.4), (2.5)) représentent les sections efficaces différentielles de diffusion élastique obtenues par impact d'électrons sur la molécule α -tétrahydrofurfurylique (THFA; $C_5H_{10}O_2$) qui sont calculées par la méthode de déphasage présenté dans la partie (1.3.1), de plus cette méthode a été utilisée avec succès par Aouchiche et collaborateurs pour la molécule d'eau [26], d'ammoniac (NH_3), chlorure d'hydrogène (HCl), le sulfure d'hydrogène (H_2S) [29], [36]. Récemment (2021) Jelena et al. [37] ont utilisé cette méthode pour calculer les sections efficaces différentielles pour la molécule de méthane (CH_4) aussi, Mokrani et al. [7] ont utilisé la même méthode pour calculer les sections efficaces différentielles pour les quatre bases d'ADN (adénine, cytosine, guanine, thymine). Dans ce travail il est impossible de présenter 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 résultats expérimentaux existent dans la littérature. Les résultats ont été obtenus par l'utilisation des différentes contributions dues aux différents potentiels, sachant que I_s est le terme due au potentiel statique (coulombienne) représenté en trait rouge, le terme $I_s + I_{ss}$ en trait bleu, le terme $I_s + I_{ss} + I_L + I_{LS}$ qui représentent la section efficace différentielle sans la multiple diffusion en trait noir et le terme $I_s + I_{ss} + I_L + I_{LS} + I_{SD}^1 + I_{DD}^0$ représentent la section efficace englobant tous les phénomènes physique en trait rose (voir éq 1.61).

2.3.1 Section efficace différentielle en fonction de l'angle de diffusion

Nous avons calculé les sections efficaces différentielles pour différentes valeurs d'énergie 50 eV, 60 eV, 80 eV, 100 eV, 120 eV, 150 eV, 200 eV, 250 eV, 300eV, 500 eV, 700 eV, 1000 eV par la méthode de déphasage présenter dans la partie (1.3 .1) de plus ces valeurs d'énergies ont été choisies en fonction des résultats disponibles dans la littérature pour tester notre méthode de calcul. L'ensemble des résultats obtenus sont représentés sur les trois figures suivantes : (2.2), (2.3) et (2.4).

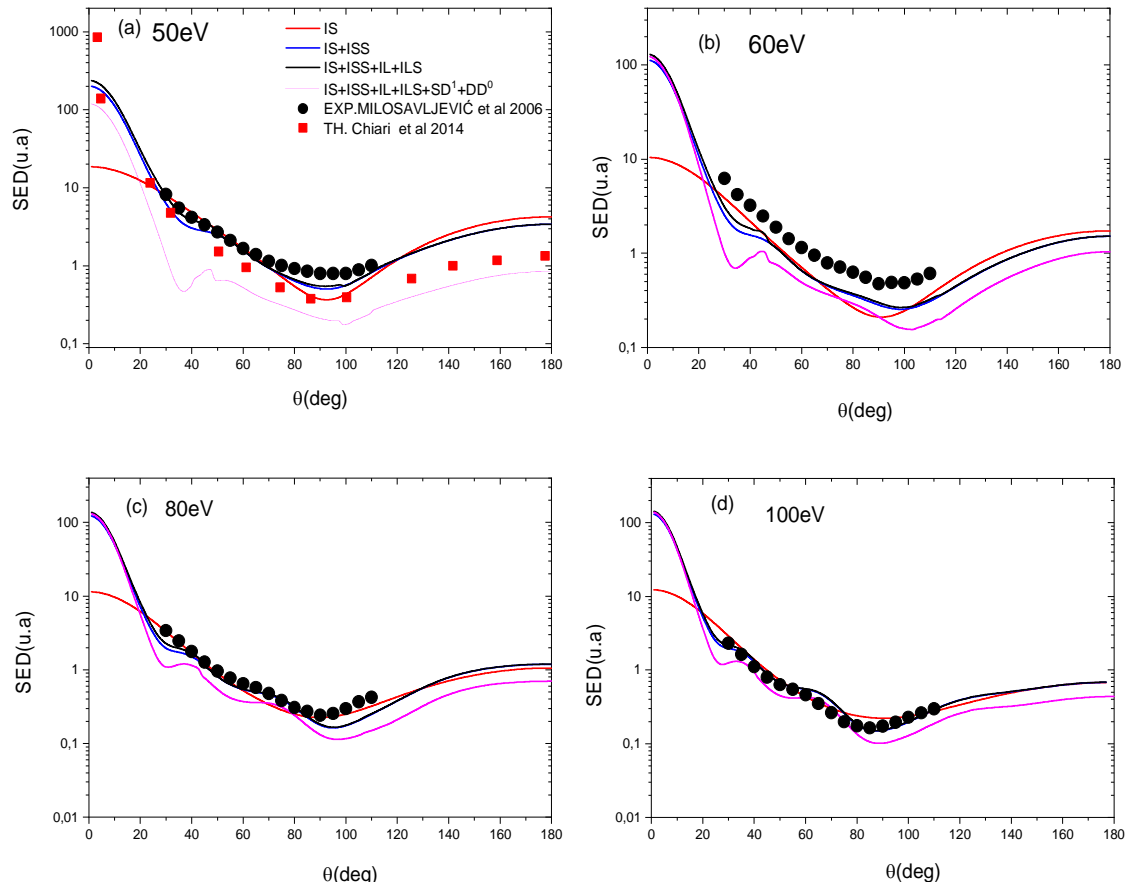


Figure 2.2 - Variation de la section efficace différentielle de la molécule α -tétrahydrofurfurylique (THFA; $C_5H_{10}O_2$) en fonction de l'angle de diffusion θ_d pour les énergies incidentes 50 eV, 60 eV, 80 eV et 100 eV.

La Figure (2.2) représente la variation de la section efficace différentielle en fonction de l'angle de diffusion pour des énergies incidentes de projectile 50 eV (Figure. 2. 2. a), 60 eV (Figure. 2. 2. b), 80 eV (Figure. 2. 2. c) et 100 eV (Figure. 2. 2. d)

Pour l'énergie incidente $E_i = 50 \text{ eV}$ (figure (2.2.a)), on remarque que les différentes contributions des sections efficaces ont la même forme. Lorsque on introduit uniquement le terme I_s (courbe rouge) qui représente la section efficace due à la contribution du potentiel coulombienne, on constate que l'amplitude de diffusion est importante à faibles angles de diffusion ($\theta_d \leq 10$), puis diminue jusqu'à atteindre un minimum aux environs de $\theta_d = 90^\circ$ et par la suite la section efficace différentielle augmente. Quand on ajoute la contribution interatomique I_{ss} (courbe bleu) l'amplitude augmente pour les faibles angles de diffusion. On

perçoit à $\theta_d = 121^\circ$ et dans la gamme angulaire compris entre $\theta_d = 53^\circ$ et $\theta_d = 74^\circ$ l'effet de l'interaction inter-atomique est négligeable. A partir de $\theta_d = 121^\circ$ l'amplitude de diffusion diminue et on remarque aussi que la profondeur des minimums est légèrement diminuée et aussi décalé vers le haut.

Quand on rajoute les deux termes I_L et I_{LS} qui représentent les sections efficaces dues respectivement à la contribution du potentiel à longue portée et aux interférences entre le potentiel statique et les potentiels d'échange, corrélation et polarisation (courbe noire) induit une légère augmentation pour les faibles angles de diffusion. Pour $\theta_d = 49^\circ, 86^\circ$ et dans la gamme angulaire compris entre $\theta_d = 49^\circ$ et $\theta_d = 86^\circ$ et on constate aussi pour les angles de diffusions ($\theta_d \geq 100$), l'effet de la contribution de I_L et I_{LS} est négligeable, de plus le minimum est légèrement reculé vers le haut. En prenant en considération les deux termes de la multiple diffusion I_{SD^1}, I_{DD^0} (courbe rose), nous constatons une diminution de l'amplitude de diffusion sur toute la gamme d'angle de diffusion avec l'apparition de deux minimums aux alentours de $\theta_d = 37^\circ$ et $\theta_d = 100^\circ$. La comparaison des résultats obtenues pour la section efficace différentielle de la diffusion élastique d'électrons par la cible ($C_5H_{10}O_2$) pour l'énergie incidente $E_i = 60 \text{ eV}$ avec les mesures expérimentales rapportés par Milosavljevic et al. [38] et les mesures théoriques de Chiari et al. [39] montrent qu'il y a un bon accord sur toute la gamme des angles de diffusion.

Pour l'énergie $E_i = 60 \text{ eV}$, la figure (2.2.b) montre que l'amplitude de diffusion de terme I_s (courbe rouge) est importante à faible angle de diffusion, aussitôt elle diminue jusqu'à atteindre un minimum autour de $\theta_d = 90^\circ$, ensuite la section efficace différentielle augmente. Lorsqu'on ajoute la contribution inter-atomique I_{ss} (courbe bleu) l'amplitude augmente pour les faibles angles de diffusion et la profondeur du minimum diminue, puis elle est décalée vers le haut pour se situer aux environs de $\theta_d = 98^\circ$, on constate aussi que l'amplitude diminue pour des angles supérieurs à $\theta_d = 100^\circ$, de plus on a l'effet de l'interaction inter-atomique est négligeable aux alentours de $\theta_d = 23^\circ, \theta_d = 100^\circ$. On remarque aussi l'influence des deux termes I_L et I_{LS} est faible et on peut le considérer négligeable. On constate aussi que l'évolution de la section efficace différentielle globale est presque identique que celui observé précédemment pour l'énergie incidente $E_i = 50 \text{ eV}$ sauf qu'il y a une légère réduction dans la profondeur des minimums et une diminution de l'amplitude à cause de l'influence de multiple diffusion. On note que le résultat expérimental

rapporté par Milosavljevic et al. [38] suit la même allure que nos valeurs de sections efficaces différentielles.

Pour une énergie incidente du projectile $E_i = 80 \text{ eV}$ (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 le terme statique I_S a une amplitude importante pour les faibles angles de diffusion ($\theta \leq 10^\circ$), en suite diminue jusqu'à atteindre un minimum aux environs de $\theta_d = 90^\circ$ et au delà de cet angle la contribution I_S augmente. De plus, nous remarquons que lorsqu'on rajoute la contribution inter-atomique I_{SS} (courbe bleu) induit une augmentation de l'amplitude pour les faibles angles de diffusion, ainsi l'influence de cette dernière est négligeable pour les angles de diffusion $\theta_d = 21^\circ, \theta_d = 44^\circ, \theta_d = 59^\circ, \theta_d = 84^\circ$ et $\theta_d = 128^\circ$, on remarque aussi une petite augmentation de l'amplitude à partir de $\theta_d = 128^\circ$ l'apparition des deux termes I_L et I_{LS} n'a aucune influence. Alors que les deux termes de la multiple diffusion I_{SD^1} et I_{DD^0} présentent toujours des effets sur toute la gamme des angles de diffusion. Les différentes courbes des sections efficaces différentielles sont en accord avec le résultat expérimental rapporté par Milosavljevic et al. [38].

La figure (2.2.c), montre pour l'énergie incidente du projectile $E_i = 100 \text{ eV}$ que le rapprochement devient important entre les différentes courbes obtenues. On note aussi certains de ces courbes se superposent et sont même difficiles à distinguer et qui sont confondues avec le résultat expérimental rapporté par Milosavljevic et al. [38]. Nous constatons que l'amplitude du terme I_S (courbe rouge) est importante toujours pour des angles de diffusion ($\theta_d \leq 10^\circ$). On perçoit aussi que le minimum est observé aux alentours de $\theta_d = 90^\circ$ pour la section efficace statique I_S (la courbe rouge) continue à s'élargir à chaque fois qu'on augmente l'énergie de l'électron incident. De plus, on constate que l'influence du terme d'interaction inter-atomique I_{SS} (courbe bleu) existe toujours pour des faibles angles de diffusion. Par contre cette interaction devient négligeable pour des angles de diffusion $\theta_d = 19^\circ, \theta_d = 52^\circ, \theta_d = 74^\circ, \theta_d = 108^\circ$ et aussi dans la gamme angulaire comprise entre $\theta_d = 135^\circ$ et $\theta_d = 180^\circ$. Ainsi la contribution des termes 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. Les deux termes de la multiples diffusion I_{SD^1} et I_{DD^0} (courbe rose) présentent toujours leurs influences sur toute la gamme des angles de diffusion.

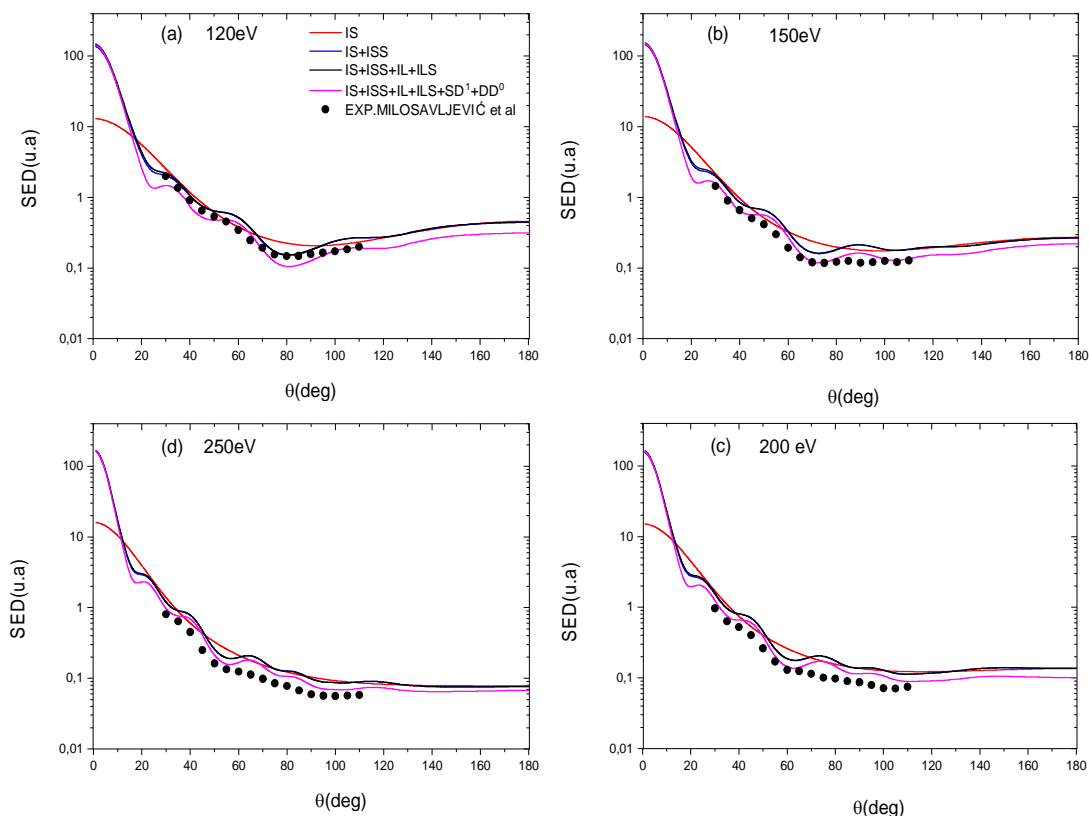


Figure 2.3 - Variation de la section efficace différentielle de la molécule α -tétrahydrofurfurylique (THFA; $C_5H_{10}O_2$) en fonction de l'angle de diffusion θ_d pour les énergies incidentes 120 eV, 150 eV, 200 eV et 250 eV.

La Figure (2.3) représente la section efficace différentielle correspondante à des énergies incidentes de projectile 120 eV (Figure. 2. 3. a), 150 eV (Figure. 2. 3. b), 200 eV (Figure. 2. 3. c) et 250 eV (Figure. 2. 3. d). Nous observons pour ces énergies, un rapprochement entre les différentes courbes obtenues deviennent de plus en plus importantes avec l'augmentation de l'énergie incidente de projectile. L'amplitude du terme I_S (courbe rouge) augmente à faible angle de diffusion ($\theta_d < 10^\circ$), on constate que le minimum qui a été observé à $\theta_d = 90^\circ$ disparaît complètement pour des énergies $E_i \geq 100 \text{ eV}$. Alors que la contribution du terme inter-atomique I_{SS} (courbe bleu) devient moins importante en augmentant l'énergie de l'électron incidente. Par ailleurs, l'effet inter-atomique joue un rôle important pour les angles de diffusion ($\theta_d < 10^\circ$). Ainsi que 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.

Pour l'énergie incidente $E_i = 120 \text{ eV}$, on constate que la section efficace différentielle englobant tous les termes physique montre deux minima aux alentours de $\theta_d = 24^\circ$ et $\theta_d = 81^\circ$, tandis que pour $E_i = 150 \text{ eV}$ la profondeur de ces minima diminue de plus sont décalés vers le haut et se déplacent pour se situer aux alentours de $\theta_d = 22^\circ$ et $\theta_d = 71^\circ$. Alors que pour $E_i = 200 \text{ eV}$ et $E_i = 250 \text{ eV}$, on remarque que l'influence des termes de multiple diffusion I_{SD^1} et I_{DD^0} (courbe rose) est devenue très minime et la section efficace différentielle évolue de la même manière mais avec une légère fluctuation. Alors que les sections efficaces différentielles calculées par notre modèle montrent un excellent accord avec celle mesurées par Milosavljevic et al. [38] pour des énergies $E_i = 120 \text{ eV}$ et $E_i = 150 \text{ eV}$. Par ailleurs, pour des énergies $E_i = 200 \text{ eV}$ et 250 eV , on constate que la contribution des sections efficaces différentielles calculées théoriquement ont la même allure que de celles mesurées par Milosavljevic et al. [38].

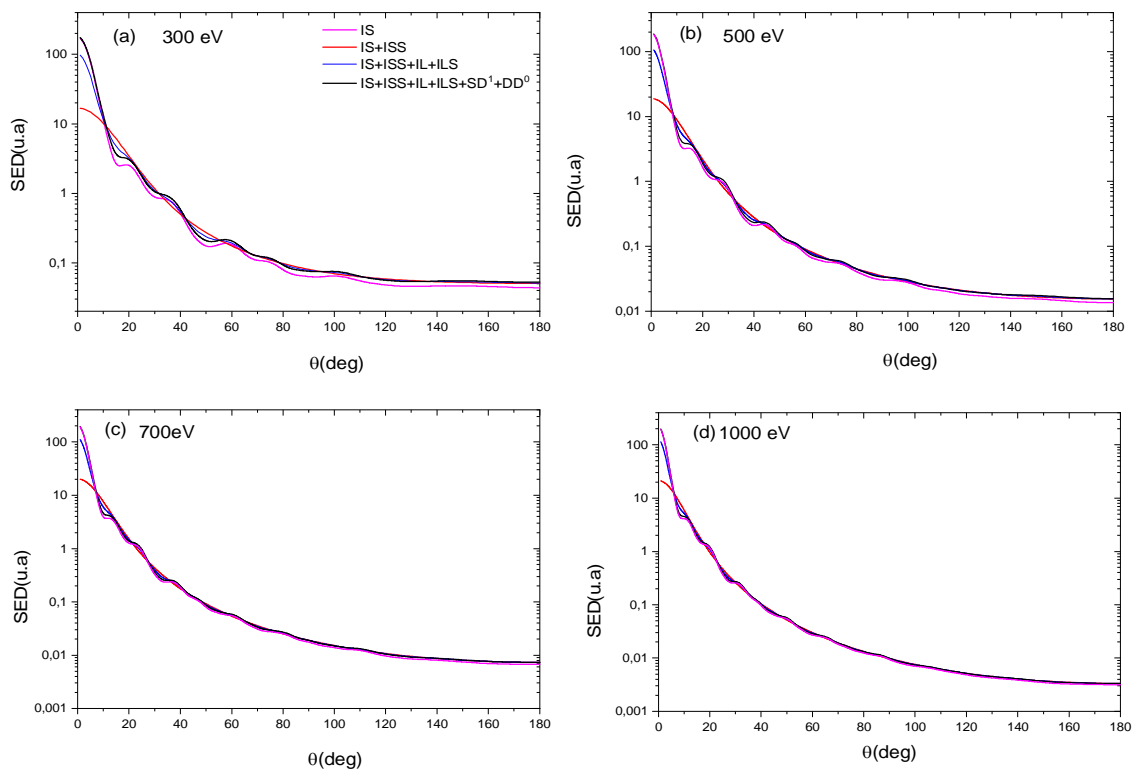


Figure 2.4 - Variation de la section efficace différentielle de la molécule α -tétrahydrofurfurylique (THFA; $C_5H_{10}O_2$) en fonction de l'angle de diffusion θ_d pour les énergies incidentes 300 eV, 500 eV, 700 eV et 1000 eV.

La Figure (2.4) représente la section efficace différentielle correspondante à des énergies incidentes de projectile 300 eV (Figure. 2.4. a), 500 eV (Figure. 2.4. b), 700 eV (Figure. 2.4. c) et 1000 eV (Figure. 2.4. d).

D'après l'énergie incidente de projectile $E_i = 300 \text{ eV}$, l'amplitude de terme I_S est importante pour les faibles angles de diffusion, l'apparition des termes I_{SS} , I_L et I_{LS} respectivement induit une augmentation dans l'amplitude pour les faibles angles de diffusion ($\theta_d < 10^\circ$) au delà de cet angle l'influence de ces termes diminue, on constate aussi que l'effet des termes de la multiple diffusion I_{SD^1} et I_{DD^0} est négligeable pour les faibles angles de diffusion ($\theta_d < 10^\circ$) et très faible dans le reste de la gamme angulaire. De plus on voit les différentes contributions contiennent des fluctuations sur toute la gamme d'angle de diffusion sauf la contribution statique (I_S).

Les différentes courbes représentées dans les figures (2.4.b), (2.4.c), (2.4.d) pour des énergies de l'électron incident $E_i = 500 \text{ eV}$, $E_i = 700 \text{ eV}$ et $E_i = 1000 \text{ eV}$ ont le même comportement que les courbes représentés dans la figure précédente (2.4.a) sauf que l'influence des différents termes diminue avec l'augmentation de ces énergies, par ailleurs cette influence de multiple diffusion est négligeable dans la gamme angulaire comprise entre $\theta_d = 35^\circ$ et $\theta_d = 180^\circ$ pour l'énergie $E_i = 500 \text{ eV}$ et entre $\theta_d = 30^\circ$ et $\theta_d = 180^\circ$ pour l'énergie $E_i = 700 \text{ eV}$. Par contre pour l'énergie incidente $E_i = 1000 \text{ eV}$ 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 ($\theta_d > 10^\circ$) et cela est dû au fait que les potentiels de corrélation-polarisation et d'échange n'ont aucun effet pour l'énergie 1000 eV. On constate aussi pour cette énergie incidente les fluctuations disparaissent complètement et l'effet de potentielle statique persiste toujours.

2.3.1 Sections efficaces différentielles en fonction des énergies incidentes

Nous avons calculé les sections efficaces différentielles pour différentes valeurs d'angles de diffusion 30° , 50° , 90° par la méthode de déphasage présentée dans la partie (1.3.1), les résultats sont représentés sur la figure (2.5). Ces valeurs ont été choisies en fonction des résultats disponibles dans la littérature.

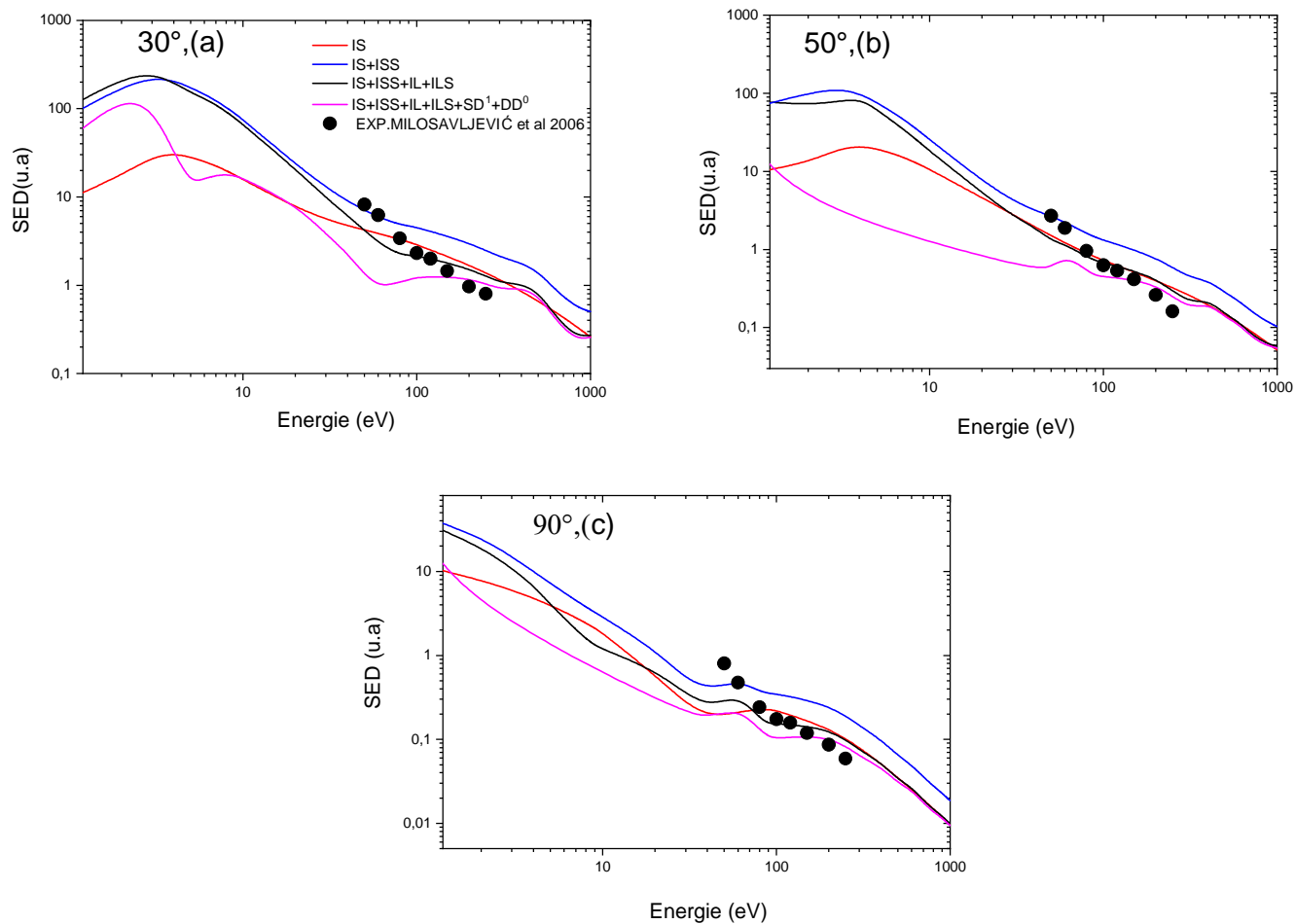


Figure 2.5 - Variation de la section efficace différentielle de la molécule α -tétrahydrofurfurylique (THFA; $C_5H_{10}O_2$) en fonction de l'énergie incidente pour des angles de diffusion $\theta_d = 30^\circ$, 50° , 90° .

La figure (2.5) représente la section efficace différentielle en fonction de l'énergie incidente correspondante aux angles de diffusion $\theta_d = 30^\circ$ (Figure. 2. 5. a), $\theta_d = 50^\circ$ (Figure. 2. 5. b), $\theta_d = 90^\circ$ (Figure. 2.5.c). Dans une première analyse de la figure 2.5, on remarque que pour tous les angles, les courbes des différentes contributions n'ont pas la même allure et aussi l'amplitude est différente.

Pour l'angle de diffusion $\theta_d = 30^\circ$, nous constatons que l'amplitude associée au terme I_S augmente pour les faibles énergies incidentes jusqu'à atteindre un maximum aux alentours de $E_i = 4.3 \text{ eV}$, puis elle diminue pour des énergies importantes. Lorsqu'on rajoute l'interaction inter-atomique I_{SS} , on remarque une augmentation de l'amplitude sur toute la gamme énergétique. Par ailleurs, le maximum est décalé pour se situer aux alentours de

$E_i = 3.5 \text{ eV}$ l'apparition des deux termes I_L et I_{LS} induit à une augmentation de l'amplitude pour les faibles énergies ($E_i \leq 3.7 \text{ eV}$), au-delà l'amplitude diminue dans le reste de la gamme énergétique. On prenant les deux termes de la multiple diffusion I_{SD^1} et I_{DD^0} , nous constatons une diminution de l'amplitude de diffusion sur toute la gamme énergétique avec l'apparition de deux minimums aux alentours de $E_i = 5.4 \text{ eV}$ et $E_i = 67 \text{ eV}$ et on perçoit aussi pour des énergies incidentes supérieure à 557 eV , l'effet de la multiple diffusion est très faible.

D'après la figure (2.5.b), on remarque que pour l'angle de diffusion $\theta_d = 50^\circ$, l'amplitude de terme statique (I_S) augmente pour les faibles énergies incidentes jusqu'à atteindre un maximum aux alentours de $E_i = 4 \text{ eV}$, puis elle diminue pour des énergies importante. L'apparition de terme inter-atomique (I_{SS}) induit une augmentation sur toute la gamme énergétique, de plus le maximum est décalée pour se situer aux alentours $E_i = 2.9 \text{ eV}$. Lorsque on rajoute les deux termes I_L et I_{LS} , on remarque une diminution sur toute la gamme énergétique et le maximum se décale pour se situer aux alentours $E_i = 3.7 \text{ eV}$. On prend en considération les deux termes de la multiple diffusion I_{SD^1} et I_{DD^0} (courbe rose) on remarque que l'amplitude diminue sur tout la gamme des énergies incidentes et on constate aussi les effets de la multiple diffusion est négligeable pour des énergies $E_i > 400 \text{ eV}$.

La figure (2.2.c), montre pour l'angle de diffusion $\theta_d = 90^\circ$, l'amplitude du terme I_S (courbe rouge) diminue avec l'augmentation de l'énergie incidente jusqu'à atteindre un minimum autour de $E_i = 42 \text{ eV}$, puis on remarque une légère augmentation avec l'apparition d'un maximum aux alentours de $E_i = 93 \text{ eV}$, ensuite la section efficace différentielle diminue sur le reste de la gamme énergétique. Lorsqu'on rajoute la contribution inter-atomique I_{SS} (courbe bleu), l'amplitude augmente sur toute la gamme énergétique, la position de maximum est la même que la courbe précédente (rouge) avec la disparition de minimum, l'apparition des deux terme I_L et I_{LS} induit une diminution sur toute la gamme énergétique avec l'apparition d'un nouveau minimum autour de $E_i = 96 \text{ eV}$. On prend en considération les deux termes de la multiple diffusion I_{SD^1} et I_{DD^0} , on constate une diminution de l'amplitude, la position de maximum et de minimum est la même que la courbe précédente (noir) et d'après l'énergie de $E_i > 560 \text{ eV}$ l'effet de la multiple diffusion est négligeable. Par conséquent, nous pouvons comparer les résultats obtenus pour les sections efficaces différentielles de la diffusion élastique d'électrons par la cible THFA pour les angles de

diffusion $\theta_d = 30^\circ$, $\theta_d = 50^\circ$ et $\theta_d = 90^\circ$ avec les mesures expérimentales rapportées par Milosavljevic et al. [38]. Nos résultats montrent que nos valeurs théoriques coïncident très bien avec ces mesures expérimentales.

2.4 Section efficace intégrale

La section efficace intégrale est obtenue par intégration sur l'angle solide de diffusion Ω des sections efficaces différentielle qui sont calculées par deux méthodes différentes présentées dans la partie (1.3). Pour les énergies d'impact inférieures à 20 keV (partie (1.3.1)), nous avons utilisé la méthode de déphasage (onde partielle) qui constitue la base de notre calcul, quant aux énergies incidentes supérieures à 20 keV nous avons utilisé la première approximation de Born car la cible est faiblement perturbée vue la rapidité des électrons incidents. Cette approche est utilisée avec succès par Champion et ses collaborateurs [27], [40] pour étudier les collisions inélastiques (ionisation, excitation...).

La figure (2.6) représente la variation de la section efficace intégrale de la molécule de α -tétrahydrofurfurylique (THFA; $C_5H_{10}O_2$) pour des énergies incidentes allant de 20 eV jusqu'à $7 \cdot 10^5$ eV. D'après cette figure on constate que l'amplitude de la section efficace intégrale est plus importante pour les faibles énergies incidentes, puis diminue de façon monotone avec l'augmentation de l'énergie incidente et cela est dû au fait que les effets d'échange, de polarisation-corrélation et la multiple diffusion sont négligeables pour les hautes énergies d'impact. La comparaison de la section efficace intégrale obtenue avec les résultats expérimentaux de Mozejko et al. [10] montre un bon accord dans la gamme où ces derniers existent. De plus nos résultats présentent la même allure que les mesures de Milosavljevic et al. [38] avec une amplitude légèrement supérieure.

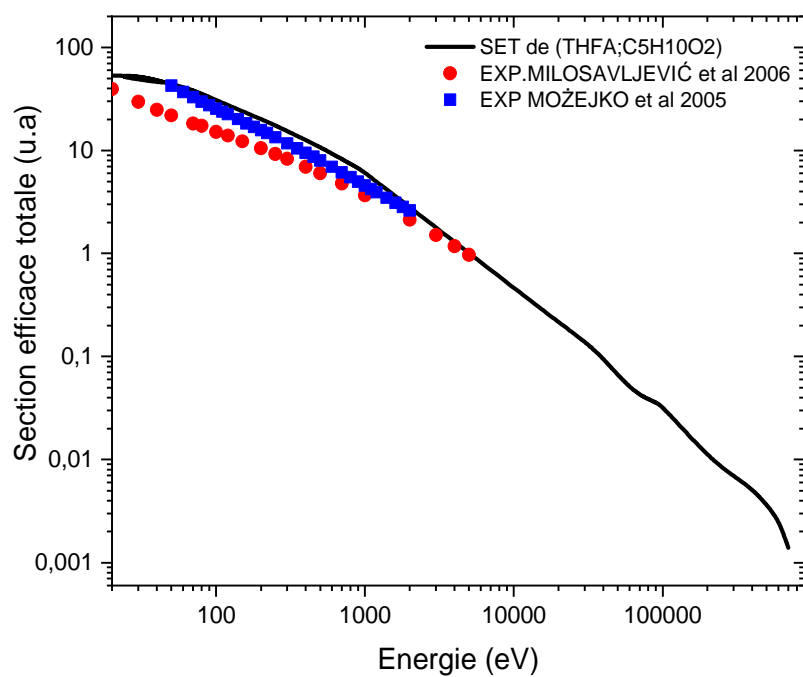


Figure 2.5 - Variation de la section efficace intégrale de la molécule α -tétrahydrofurfurylique (THFA; $C_5H_{10}O_2$) en fonction de l'énergie incidente.

Conclusion générale

Dans ce travail nous nous sommes intéressés à l'étude de la diffusion élastique d'électrons par la biomolécule (THFA; $C_5H_{10}O_2$) qui est similaire au sucre d'ADN et d'ARN. L'objectif de notre travail consiste à porter particulièrement une approche théorique sur le calcul des sections efficaces différentielles (SED) et intégrales pour des différentes valeurs d'énergies incidentes et d'angle de diffusion.

Ce travail est présenté en deux chapitres, dans le premier nous avons rappelé quelques notions théoriques sur la diffusion élastique dans lesquelles on a défini les deux méthodes de calculs des sections efficaces ; la méthode de déphasage valable pour les basses énergies par contre l'approximation de Born valable pour les hautes énergies, ensuite nous avons donné les potentiels mis en jeu, en tenant compte des différentes contributions, et on a terminé ce chapitre par une description de la cible biomolécule α -tétrahydrofurfurylique (THFA; $C_5H_{10}O_2$).

Dans le deuxième chapitre, nous avons analysé les différents résultats des sections efficaces différentielles (SED) et intégrales de la diffusion élastique d'électrons par la biomoléculaire α -tétrahydrofurfurylique (THFA; $C_5H_{10}O_2$) en introduisant les différents phénomènes physique tels que l'échange, corrélation- polarisation, interaction inter-atomique et la multiple diffusion. D'une part, on a calculé les sections efficaces différentielles en fonction de l'angle de diffusion pour des énergies fixes. Nous retenons que pour des énergies inférieures à 100 eV, la section efficace différentielle due au potentiel statique admet un minimum aux environs de ($\theta_d = 90^\circ$) et s'élargit pour des énergies ($E_i \geq 100$ eV). On a constaté aussi que l'effet de l'interaction inter-atomique est important pour les faibles angles de diffusion $\theta_d \leq 10^\circ$ et il est négligeable pour les angles de diffusion élevés. On a noté que les effets des potentiels d'échange et de corrélation-polarisation sont faibles pour les énergies incidentes ($E_i \leq 100$ eV), alors que l'effet devient négligeable sur toute la gamme angulaire pour des énergies incidentes ($E_i > 100$ eV). Pour l'effet de la multiple diffusion, on a remarqué qu'il est important pour les basses énergies incidentes, cette influence diminue avec l'augmentation d'énergie incidente jusqu'à devenir négligeable pour l'énergie ($E_i = 1000$ eV), d'autre part on a calculé les sections efficaces différentielles en fonction de l'énergie incidente pour des angles de diffusion fixe, nous constatons que l'influence des contributions diffère d'un angle à autre.

Concernant la section efficace intégrale, on a remarqué que l'amplitude est importante pour les faibles énergies incidentes puis elle diminue avec l'augmentation des énergies incidentes.

Nous avons comparé les résultats obtenus avec des données théoriques et expérimentales qui existent dans la littérature, on a remarqué un bon accord. Enfin nous espérons avoir contribué par ce travail à ramener un plus à la compréhension de l'interaction d'une particule chargée avec la matière vivante. Par ailleurs, nous estimons que ce travail ouvre plusieurs voies pour l'étude et le calcul des sections efficaces différentielles et intégrales par impact d'autres projectiles tel que les protons ou les positrons.

Bibliographie

- [1] H Bethe. *An-nalen der Physics*, **397**: 325, 1930.
- [2] U Fano. *Annual review of nuclear Science*, **13**: 1, 1963.
- [3] C Peroval, F Debeaufort, A M Seuvre, B Chevet, D Despre and A Voilly. *Journal of agriculture and food chemistry*, **51**: 3120, 2003.
- [4] C Desrosiers, V Moskvin, A F Bielajew and L Papiez. *Physics in medicine and biology*, **45**: 1781, 2000.
- [5] J F Ward. *Radiation research*, **104**: 103, 1985.
- [6] S Trajmar, W William and A Kupperman. *The Journal of Chemical Physics*, **58**: 2521, 1973.
- [7] S Mokrani, H Aouchiche and C Champion. *Radiation Physics and Chemistry*, **172**: 108735, 2020.
- [8] P Barreau and J B Bellicard. *Physics Letters B*, **25**: 470, 1967.
- [9] J Bellicard and P Barreau. *Nuclear Physics*, **36**: 476, 1962.
- [10] P Mozejko and L Sanche. *Radiation Physics and Chemistry*, **73**: 77, 2005.
- [11] A R Milosavljevic, F Blanco, D Ševic, G García and B P Marinkovic. *The European Physical Journal D-Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics*, **40**: 107, 2006.
- [12] W Y Baek, M Bug, H Rabus, E Gargioni and B Grosswendt. *Physical Review A*, **86**: 032702, 2012.
- [13] M G P Homem, R T Sugohara, I P Sanches, M T Lee and I Iga. *Physical Review A*, **80**: 032705, 2009.
- [14] K A DUBEY and J Jobin. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, **54**: 115204, 2021.
- [15] F P Bardela, A J da Silva, V A S da Mata, M G P Homem, I Iga, R T Sugohara and M M Fujimoto. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, **54**: 075203, 2021.
- [16] A R Milosavljevic, A Giuliani, D Sevic, M J Huben Franskin and B P Marinkovic. *The European Physical Journal D*, **35**: 411, 2005.
- [17] A Zecca, C Perazzolli and M J Brunger. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, **38**: 2079, 2005.
- [18] P Mozejko, E Ptasińska-Denga, A Domaracka and C Szmytkowski. *Physical Review A*, **74**: 012708, 2006.
- [19] C J Colyer, V Vizcaino, J P Sullivan, M J Brunger and S J Buckman. *New Journal of Physics*, **9**: 41, 2007.

- [20] M Dampc, A R Milosavljević, I Linert, B P Marinković and M Zubek. *Physical Review A*, **75**: 042710, 2007.
- [21] C S Trevisan, A E Orel and T N Rescigno. *Journal of Physics B*, **39**: 255, 2006.
- [22] C Winstead and V McKoy. *The Journal of Chemical Physics*, **125**: 074302, 2006.
- [23] M Allan. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, **40**: 3531, 2007.
- [24] D Bouchiha, J D Gorfinkiel, L G Caron and L Sanche. *Journal of Physics B*, **39**: 975, 2006.
- [25] A Messiah. *Mécanique quantique Tome 1*, Ed Dunod Paris, 1972.
- [26] H Aouchiche, C Champion and D Oubaziz. *Radiation Physics and Chemistry*, **77**: 107, 2008.
- [27] S Mokrani, H Aouchiche and C Champion. *Indian Journal of Physics*, **92**: 7, 2018.
- [28] C C Tanoudji, B Diu and F Laloe. *Mécanique quantique*, Ed Dunod Paris, 1973.
- [29] F Medegga and H Aouchiche. *High Energy Chemistry*, **51**: 462, 2017.
- [30] J B Furness and I E McCarty. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, **6**: 2280, 1973.
- [31] C Champion, S incerti, H Aouchiche and D Oubaziz. *Radiation Physics and Chemistry*, **78**: 745, 2009.
- [32] H Aouchiche and F Medegga. *Russian Journal of Physical Chemistry A*, **93**: 116, 2019.
- [33] M H Mittleman and K M Watson. *Annals of Physics*, **10**: 268, 1960.
- [34] F Salvat. *Physical Review A*, **68**: 012708, 2003.
- [35] N T Padial and D W Norcross. *Physical Review A*, **29**: 1742, 1984.
- [36] N Sali and H Aouchiche. *Revista mexicana de física*, **64**: 498, 2018.
- [37] V Jelena and al. *International journal of Molecular sciences*, **22**: 647, 2021.
- [38] A R Milosavljevic, F Blanco, D Šević, G Garcia and B P Marinkovic. *The European Physical Journal D-Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics*, **40**: 107, 2006.
- [39] L Chiari, H V Duque, D B Jones, P A Thorn, Z Pettifer, G B Da Silva and M J Brunger. *The Journal of chemical Physics*, **141**: 024301, 2014.
- [40] H Aouchiche, S Mokrani, M A Quinto and C Champion. *International Journal of Mass Spectrometry*, **379**: 65, 2015.

Résumé

La diffusion élastique des biomolécules est encore peu étudiée aujourd'hui, tant expérimentalement que théoriquement. Dans ce contexte, le présent travail apparaît comme l'une des premières approches de mécanique quantique fournissant une description multi-différentielle du processus élastique induit par les composants de l'ADN et de l'ARN pour des énergies d'impact allant de 20 eV à $7 \cdot 10^5$ eV. Les calculs des sections efficaces sont effectués ici dans le cadre des ondes partielles et de l'approximation de Born, en tenant compte des différents potentiels tels que le potentiel statique, l'échange, la corrélation-polarisation. La cible biologique α -tétrahydrofurfuryle (THFA; $C_5H_{10}O_2$) qui est similaire au sucre de l'ADN et de l'ARN est décrite ici au moyen du système GAUSSIAN 09 en utilisant la méthode restreinte de Hartree-Fock avec optimisation géométrique. Les prédictions théoriques également obtenues ont montrés un accord raisonnable avec les sections efficaces élastiques, expérimentales, intégrales et différentielles.

Abstract

The elastic scattering of biomolecules remains still today rarely investigated on both the experimental and the theoretical sides. In this context, the present work appears as one of the first quantum mechanical approaches providing a multi-differential description of the electron-induced elastic process of the main DNA and ARN components for impact energies ranging from the 20 eV to $7 \cdot 10^5$ eV. The cross section calculations are here performed within the partial waves and Born approximation framework taking into account the different potentials such as the static potential, exchange, correlation-polarization as well. The multiple diffusion. The biological target α -tetrahydrofurfuryl (THFA; $C_5H_{10}O_2$) which is similar to DNA sugar and of RNA are here described by means of the GAUSSIAN 09 system using the restricted Hartree-Fock method with geometry optimization. The theoretical predictions also obtained have shown a reasonable agreement with the experimental integral and differential elastic cross section.