

Calcul des sections efficaces d'ionisation des molécules par impact d'un électron

Lena Mouawad^{1,4}, Paul-Antoine Hervieux², Claude Dal Cappello³, Jérôme Pansanel¹, Ziad El Bitar¹

¹Université de Strasbourg, CNRS, IPHC UMR 7178, F-67000 Strasbourg, France

²Université de Strasbourg, CNRS, IPCMS UMR 7504, F-67000 Strasbourg, France

³SRSMC, UMR CNRS 7565, University of Lorraine, BP 70239, F-54506 Vandoeuvre-les-Nancy, France

⁴AZM research center, EDST, Tripoli, Lebanese University, Lebanon

Abstract

Plusieurs études récentes ont montré qu'une partie importante des dommages induits par les rayonnements ionisants est due aux électrons de basse énergie [1,2]. Ces électrons sont produits suite à l'ionisation des molécules biologiques par impact d'électrons. L'étude de l'ionisation par impact d'électrons a été l'objet d'études diverses qui s'intéressent surtout à déterminer les sections efficaces triplement différentielles pour cette interaction [3-5]. Le calcul ainsi que la mesure de ces sections efficaces présentent plusieurs défis surtout que les molécules d'intérêt biologique sont souvent des molécules complexes comme l'ADN. Des approximations ont été proposées pour simplifier cette tâche. Une approche qui consiste à calculer les fonctions d'ondes des molécules dans une orientation moyenne au lieu de calculer la moyenne des sections efficaces déterminées pour toutes les orientations possibles permet de calculer les sections efficaces triplement différentielles des molécules complexes [6]. Néanmoins, cette méthode ne s'applique qu'à certains états et certaines molécules [7-8]. Nous proposons dans ce travail une méthodologie qui permet de simplifier le problème des molécules complexes et calculer les sections efficaces triplement différentielles sans compromettre la qualité des résultats. Pour ce faire nous avons développé un programme qui calcule ces sections efficaces pour n'importe quelle molécule, à partir du programme de chimie quantique Gaussian 09 [9]. Le programme développé est 'user friendly' et ne demande de l'utilisateur que de préciser les conditions cinématiques et la théorie employée pour décrire la collision. Jusqu'à présent, deux théories sont implémentées dans le programme chacune consiste à décrire l'électron éjecté d'une manière différente. Dans la première, il est décrit par une onde coulombienne et dans la deuxième par une onde distordue. Nous présentons dans ce travail nos résultats pour l'acide formique avec la première méthode. Nous obtenons clairement avec notre programme un meilleur accord avec l'expérience que des calculs publiés [10].

References

- [1]. Sanche, L., *Nature* **2009**, 461(7262), 358-359.
- [2]. Pan, X., & Sanche, L., *Physical review letters* **2005**, 94(19), 198104
- [3]. Milne-Brownlie, D. S., et al, *Physical Review A* **2004**, 69(3), 032701.
- [4]. Bellm, Susan Mary, et al, *Physical Review A* **2012**, 85(2), 022710.
- [5]. Colyer, C. J., Bellm, S. M., Lohmann, et al., *The Journal of chemical physics* **2010**, 133(12), 124302.
- [6]. Gao, J., Peacher, J. L., & Madison, D. H., *The Journal of chemical physics* **2005**, 123(20), 204302.
- [7]. Chaluvadi, H., Ning, C. G., & Madison, D., *Physical Review A* **2014**, 89(6), 062712.
- [8]. Ali, E., Nixon, K., Murray, et al, *Physical Review A* **2015**, 92(4), 042711.
- [9]. Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., et al, Wallingford CT: Gaussian **2004**.
- [10]. Colyer, C. J., Stevenson, M. A., Al-Hagan, et al, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **2009**, 42(23), 235207.