

Approche théorique pour le calcul des sections efficaces de l'ionisation des molécules biologiques par impact d'un électron

Léna Mouawad¹, Paul-Antoine Hervieux¹, Claude Dal Cappello², Jérôme Pansanel³, Vincent Robert⁴, Mohamad Khalil⁵, Ziad El Bitar³

¹Université de Strasbourg, CNRS, IPCMS UMR 7504, F-67000 Strasbourg, France

²Université de Lorraine, CNRS, LPCT UMR 7019, F-57000 Metz, France

³Université de Strasbourg, CNRS, IPHC UMR 7178, F-67000 Strasbourg, France

⁴Université de Strasbourg, CNRS, Laboratoire de Chimie Quantique UMR 7177, F-67000 Strasbourg, France

⁵Université Libanaise, Centre AZM pour la recherche en biotechnologie et ses applications, Tripoli, Liban

Résumé

Les sections efficaces d'ionisation des molécules biologiques sont des données essentielles pour une bonne modélisation des dommages induits par les rayonnements ionisants dans le milieu biologique. Les codes de simulation Monte Carlo sont souvent utilisés pour prévoir le comportement des particules qui traversent ce milieu [1,2]. Ces simulations se basent sur des modèles physiques dans lesquels sont implémentées des sections efficaces qui représentent les probabilités des interactions. De nombreuses études récentes montrent que les résultats des simulations sont sensibles aux sections efficaces utilisées [3]. Idéalement, des sections efficaces spécifiques à chaque composante du milieu biologique devraient être disponibles dans ces codes. Des méthodes empiriques permettent de déterminer les sections totales pour des molécules complexes en se basant sur des résultats expérimentaux mais ne permettent pas de remonter aux sections différentielles [4]. Ces dernières fournissent plus de détails sur le processus d'ionisation. D'autre part, les méthodes théoriques qui permettent de calculer également des sections différentielles sont limitées par le temps de calcul qui devient très lourd dans le cas des molécules biologiques complexes. D'où l'importance de développer un modèle qui permet de calculer à la fois les sections différentielles et totales des molécules complexes. Nous proposons alors une approche théorique basée sur la physique quantique pour décrire l'ionisation des molécules par impact d'un électron. La première approximation de Born est utilisée pour décrire les états de l'électron projectile et l'électron éjecté. La cible est décrite par le logiciel de chimie quantique Gaussian [5] qui permet d'avoir les fonctions d'ondes des orbitales moléculaires de n'importe quelle molécule connaissant simplement sa géométrie. On convertit ensuite les fonctions d'ondes multicentriques calculées par Gaussian en fonctions à un centre commun, simplifiant ainsi les calculs. Les fonctions d'ondes sont aussi développées en terme d'ondes partielles ce qui permet de développer un programme parallèle pour réduire le temps de calcul. Suivant cette méthode, on arrive à calculer des sections triplement différentielles de quelques molécules relativement complexes [6,7]. En intégrant ces dernières on arrive également à calculer les sections doublement et simplement différentielles ainsi que les sections totales.

Références

- [1] H. Nikjoo *et al*, *Radiat. Prot. Dosim.*, 99(1-4), 77-80, **2002**.
- [2] L. Zhang and Z. Tan, *Radiat. Environ. Biophys.*, 49(1), 15-26, **2009**.
- [3] M. C. Fuss *et al.*, *J. Appl. Phys.*, 117(21), 214701, **2015**.
- [4] Ph. Bernhardt and H. G. Paretzke, *Int. J. Mass Spectrom.*, 223-224, 599-611, **2003**.
- [5] M. J. Frisch *et al.*, *Gaussian 09*, Revision A, Gaussian Inc, Wallingford CT, **2009**.
- [6] L. Mouawad *et al.*, *J. Phys B*, 51(17), 175201, **2018**.
- [7] L. Mouawad *et al.*, *J. Phys B*, 50(21), 215204, **2017**.