

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITE MOHAMED SEDDIK  
BEN YAHIA - JIJEL



FACULTE DES SCIENCES EXACTES ET INFORMATIQUE  
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



Série : .....

**Mémoire présenté pour obtenir le diplôme de  
Master en physique**

**Spécialité : Physique Médicale**

**Par**

**LATRECHE Khawla**

**BOUSSEKRA Ghada**

**Intitulé**

**La différence dans l'effet des rayonnements ionisants  
sur la matière vivante et non vivante**

Soutenue le : **07/13 /2022** devant le jury:

Président :	M.Souici	MCA Univ. de Constantin 3
Rapporteur :	N.Benmiçia	MAA Univ. de Jijel
Examineurs :	A.Boukhelout	MAA Univ. de Jijel

## **REMERCIEMENTS**

*C'est une tâche difficile de trouver les plus justes mots pour exprimer ses*

*« Meris »*

*C'est paradoxalement la dernière page qu'on rédige et qu'on croise en premier. Avant tout, nous remercions Dieu tout puissant de nous avoir donné la volonté et le pouvoir afin d'accomplir ce travail. Comme nous tenons à remercier nos familles pour les sacrifices qu'elles ont fait, et tous ceux qui ont participé de loin ou de près à la réalisation de notre mémoire de fin d'étude et en particulier un très grand remerciement à notre promoteur : **BENMISIA.N**, pour son soutien moral et d'avoir encadré et suivi notre travail de près, avec sa rigueur scientifique, ses conseils durant l'évolution de ce travail, pour sa modestie et ses idées claires, pertinentes et encouragements. Nous remercions également aux membres de jury et qui nous ont fait l'honneur d'accepter de juger notre travail qu'ils soient assurés de notre profonde gratitude. Nous adressons aussi nos sincères remerciements à "**DR. DOUNOCHI NABIL**" et tous les enseignants du Master **PHYSIQUE MEDICAL**. Nous tenons également à s'excuser auprès des personnes qui nous ont aidées, les auteurs dont on a utilisé les documents sans les avoir cités dans les remerciements ou dans la bibliographie. Enfin, nous remercions tout le personnel du département de **PHYSIQUE** de l'université de **Sijel**.*

## *Dédicace*

*Au nom D'ALLAH, le tout miséricordieux le très miséricordieux*

*Je dédie ce travail à*

*Ma chère maman*

**NADIA**

*Mon cher père*

**NACER**

*A mon modèle, chère sœur LAMISSE*

*À mon cœur ma sœur CHAHD*

*A ma petite sœur DALAA*

*Ma petite famille HADADE HUSSEM*

*Les petites filles de ma tante FAIZA : RAZANE, SOUZANE, RAWAN*

*À ma binôme KHAWLA*

*Enfin je le dédie à tous mes amis que je n'ai pas cités et à tous ceux qui me  
connaissent*

**Ghada**

## *Dédicace*

*Avec joie, fierté et respect, je dédie ce mémoire : Au plus beau sourire de ma vie, à la femme la plus merveilleuse qu'existe, ma chère maman*

**NADJET**

*À celui qui m'a appris que le monde est un combat et que son arme est la connaissance, à l'homme le plus grand et le plus cher de ma vie, mon  
cher père*

**AHMED.**

*À mes frères qui sont un morceau de mon âme*

**WALID, AYMEN, ZEYNEB.**

*À ma seconde moitié et mon mari **KARIM.***

*À toute la famille **LATRECHE** et la famille **DAIKH.***

*À ma binôme **GHADA** et sa famille **BOUSSAKRA.***

*Je ne peux pas finir sans remercier mon ami intime : **SAMAH.***

*Enfin je le dédie à tous mes amis que je n'ai pas cités et à tous ceux  
qui me connaissent.*

***Khawla***

## Table des matières

Introduction générale..... 01

### Chapitre I : Généralités sur les rayonnements

Introduction .....03

I. Classification de rayonnement..... 03

I.1. Classification de rayonnement selon la nature physique .....03

I.1.1. Les rayonnements électromagnétiques..... 03

I.1.2. Les rayonnements particuliers .....04

I.1.2.1. Les particules chargées légères .....04

I.1.2.2. Les particules chargées lourdes .....04

I.2. Classification de rayonnement selon les effets.....05

I.2.1. Les rayonnements ionisants .....04

I.2.1.1. Les rayonnements directement ionisants .....05

I.2.1.2. Les rayonnements indirectement ionisant .....05

I.2.2. Les rayonnements non ionisants .....05

II. Les types d'interaction rayonnements- matière .....06

II.1. Interaction des photons avec la matière .....06

II.1.1. L'effet photoélectrique .....06

II.1.2. L'effet Compton .....06

II.1.3. Création des paires ..... 07

II.1.4. Diffusion Thomson-Rayleigh ..... 08

II.2. Interaction particules chargées-matière .....09

II.2.1. Ionisation .....09

II.2.2. Excitation .....10

II.2.3. Rayonnement de freinage .....10

III. Les grandeurs physiques.....11

III.1. Le coefficient d'atténuation .....	11
III.2. Le pouvoir d'arrêt (S) .....	11
III.3. Transfert d'énergie linéique (TEL) .....	11
III.4. Le Parcours (R) .....	12
III.5. Le flux.....	12
III.5.1. Le flux particulaire .....	12
III.5.2. Le flux énergétique .....	12
III.6. La fluence.....	12
III.6.1. La fluence particulaire .....	12
III.6.2. La fluence énergétique .....	13
IV. Les grandeurs dosimétriques.....	14
IV.1. La Dose absorbée .....	13
IV.2. La dose équivalente .....	13
IV.3. La dose efficace .....	13
V. structure d'ADN .....	14
VI. Les effets biologie des rayonnements ionisants sur l'ADN .....	15
• La coupure simple brin (CSB).....	15
• Les coupures double brin (CDB) .....	16
• Les pontage d'ADN protéine .....	16
• Les modifications chimiques des bases d'ADN :.....	16
VII. ADN plasmidique.....	16

## **Chapitre II : Méthode de Simulation Monte Carlo**

Introduction.....	18
I. Généralités sur Simulation Monte Carlo et principe .....	18
• Simulation de transport de photons .....	18
• Simulation de transport des électrons :.....	19
- Classe I.....	19
- Classe II.....	19

II. Exemples des codes de simulation monte Carlo.....	19
II.1. GEANT4, GEANT4-ADN .....	19
II.2. MCNP .....	20
II.3. EGS .....	20
II.4. PHITS .....	21
II.4.1. Définition de PHITS .....	21
II.4.2. Structure du code .....	21
II.4.2.1. Le fichier d'entrée (.input) .....	21
II.4.2.2 Les sections de PHITS.....	22
II.4.2.2.1. Section titre et paramètres .....	22
II.4. 2.2.2 Section La géométrie .....	22
II.4.2.2.3 sections Les tallies .....	24
III. Difficultés de code PHITS .....	25

### **Chapitre III : Résultats et interprétation**

I. Description de la géométrie.....	26
I.1. Description de la source.....	26
I.2. Description des matériaux.....	26
II. résultats et interprétation.....	27
Conclusion .....	39

## Liste des figures

### Chapitre I

<b>Figure I.1</b> : Classification des rayonnements.....	05
<b>Figure I.2</b> : l'effet photoélectrique .....	06
<b>Figure I.3</b> : l'effet Compton .....	07
<b>Figure I.4</b> : la création de paires .....	07
<b>Figure I.5</b> : La diffusion Rayleigh .....	08
<b>Figure I.6</b> : Représentation de la prédominance relative des trois processus d'interaction photons avec matière .....	09
<b>Figure I.7</b> : Phénomène d'ionisation .....	09
<b>Figure I.8</b> : Phénomène d'excitation .....	10
<b>Figure I.9</b> : Phénomène de freinage .....	10
<b>Figure I.10</b> : structure de base azotées.....	14
<b>Figure I.11</b> : structure chimique de l'ADN.....	15
<b>Figure I.12</b> : Représentation schématique des principaux dommages de l'ADN produits par des effets directs et indirects .....	16
<b>Figure I.13</b> : Les trois formes de l'ADN plasmidique .....	17

### Chapiter III

<b>Figure III.1</b> : le trajet des électrons(a) et photons (b) obtenu par [T-Track] section.....	27
<b>Figure III.2</b> : le trajet des électrons(a) et photons (b) obtenu par [T-Track] section.....	27
<b>Figure III.3</b> :courbe la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.....	28
<b>Figure III.4</b> : le trajet des électrons(a) et photons (b) obtenu par [T-Track] section .....	29
<b>Figure III.5</b> : le trajet des électrons(a) et photons (b) obtenu par [T-Track] section.....	29
<b>Figure III.6</b> : courbe la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incident.....	30
<b>Figure III.7</b> : le trajet des électrons(a) et photons (b) obtenu par [T-Track] section.....	31
<b>Figure III.8</b> : le trajet des électrons(a) et photons (b) obtenu par [T-Track] section.....	31



<b>Figure III.9:</b> courbe la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.....	32
<b>Figure III.10:</b> courbe la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.....	33
<b>Figure III.11:</b> courbe la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.....	33
<b>Figure III.12:</b> courbe la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.....	34
<b>Figure III.13:</b> courbe la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.....	36
<b>Figure III.14:</b> courbe la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.....	37

## Liste des tableaux

### Chapitre I

**Tableau I.14** : Résumé des termes- définition-unités..... 14

### Chapitre II

**Tableau II.1** : des surfaces exprimées par des équations.....23

**Tableau II. 2** : macro body .....24

### Chapitre III

**Tableau III.1:** Pourcentages atomique des composants d'ADN..... 26

**Tableau III.2** : Pourcentages atomique d'Arg..... 28

**Tableau III.3** : la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente..... 28

**Tableau III.4** : la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente..... 30

**Tableau III.5** : la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.....32

**Tableau III.6** : la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente..... 34

**Tableau III.7** : la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.....35

**Tableau III.8** : la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente..... 35

**Tableau III.9** : la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente..... 36

**Tableau III.10** : la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.....36

**Tableau III.11:** la variation d'énergie transféré aux électrons en fonction d'énergie incidente..37

## *Liste des abréviations*

ADN : Acide désoxyribonucléique

Arg : Arginine

CDB : Cassure double brin

CSB : Cassure simple brin

TEL : Transfert d'énergie linéique

KeV : Kilo Electron Volt E : d'énergie cinétique

DLI : Densité Linéique d'Ionisation

S : Pouvoir d'arrêt

R : Parcours

D : Dose absorbée

Gy : Gray

HT : La dose équivalente

Sv : sievert

ECG: Electron-Gamma Shower

E. COLI: Escherichia coli EPS: Enhanced PostScript

Geant4: Geometry and Tracking 4

GC: Geometries combinatoire

GG : Géométrie générale

MeV : Méga Electron Volt

MC : Monte Carlo

MCNP : Monte Carlo N particule transport

PHITS: Particles and Heavy Ions Transport System

Pb: Pair de bases

PENELOPE: Penetration and Energy loss of positrons and electrons

TeV : Tesla électrons volt

$\rho$  : densité

# *Introduction générale*

## **Introduction :**

Le rayonnement fait toujours partie de la vie quotidienne sur notre terre. Au cours de notre vie, nous sommes exposés quotidiennement à des rayonnements dont certains sont dangereux pour notre santé et d'autres ne l'affectent pas. En général, le rayonnement peut être défini comme la façon dont l'énergie est transmise à travers l'espace, sous la forme d'ondes électromagnétiques ou de particulaires. Il peut être détecté et distingué par ses interactions avec la matière dans lequel il se propage. L'exposition aux rayonnements nucléaires entraîne constamment des modifications chimiques dans les tissus des organismes vivants, ce qui représente l'effet principal des rayonnements sur la santé et est directement lié à la dose reçue, ce qui entraîne des dégâts graves à l'organisme en général et à l'ADN en particulier, il se fait au niveau cellulaire et moléculaire, ces dommages sont directs ou indirects peuvent être réparés ou mal réparés ce qui conduit au cancer ou à des anomalies génétiques. Après la deuxième guerre mondiale la propagation des cancers provoque les chercheurs scientifiques de développer les méthodes de traitement des tumeurs cancéreuses, Parmi ces méthodes il y a la simulation de Monte Carlo.

La méthode Monte Carlo est une méthode statistique qui utilise des générateurs de nombres aléatoires, des distributions de probabilité et des sections efficaces considérées comme moyennes. Plusieurs codes de simulation ont été développés et utilisés dans des applications telles que MCNP, GEANT4, EGS5 et PHITS et d'autres, pour la prévisibilité et le suivi des particules secondaires émises, en plus de la description aléatoire des interactions physiques, permettant la possibilité d'estimer les risques liés à l'exposition aux rayonnements ionisants au niveau moléculaire et plus précisément, d'évaluer la complexité des dommages à l'ADN.

Notre travail a été réalisé dans le cadre du mémoire de fin d'études, consiste à déterminer l'énergie transférée aux électrons et photons secondaires générés par un faisceau d'électrons avec des énergies variables sur des solutions qui contiennent eau, d'ADN plasmidique, Arginine et nanoparticules d'Or. Cette mémoire se décompose en trois chapitres :

**Le premier chapitre :** c'est une rappelle sur les bases physiques des différentes interactions des rayonnements avec la matière et décrit les grandeurs physique et dosimétrique, à la fin de ce chapitre nous présentons brièvement la structure et l'effet biologique des rayonnements ionisant sur l'ADN.

**Le deuxième chapitre :** la première partie de ce chapitre sera consacrée à la description de la méthode de simulation Monte Carlo où nous avons présentée quelques types les plus

couramment utilisés récemment tels que : MCNP, GEANT4, EGS5 et PHITS. Dans la deuxième partie, nous avons détaillé le code que vous utiliserez dans notre étude, qui est PHITS.

**Dans le troisième chapitre :** nous présentons nous résultat de simulation à l'aide de code PHITS version 3.16 due à l'irradiation des solutions différentes par les électrons. On a calculé la variation d'énergie transféré aux électrons et photons secondaires en fonction d'énergie d'électron incident. Ce qui conduit à montrer l'effet de la densité d'une solution sur l'énergie déposée au milieu irradiée. On finit par une interprétation globale et une conclusion.

*Chapitre I : Généralités sur  
les rayonnements*

### Introduction :

On peut définir un rayonnement comme un mode de propagation de l'énergie dans l'espace, sous forme de particules ou de photons. Les rayonnements ne peuvent être caractérisés et détectés qu'à travers leurs interactions avec la matière dans laquelle ils se propagent. Ils peuvent céder au milieu traversé, une partie ou la totalité de leur énergie. Le milieu absorbant subit donc des modifications dues à l'absorption des rayonnements, ils peuvent être classés en deux catégories selon leur effet sur la matière : ionisants et non ionisants, et selon leur nature : Particules et électromagnétisme. Le rayonnement est dit ionisant lorsqu'il est capable d'extraire des électrons de la matière. Une définition plus complète est donnée : « Le rayonnement ionisant est le transfert d'énergie sous forme de particules ou d'ondes électromagnétiques d'une certaine longueur d'onde, on distingue les particules chargées qui sont directement ionisées de celles qui sont dites indirectement ionisées car non chargées. Brièvement, dans ce chapitre. Nous intéressons à la matière vivante. Nous décrivons les principaux concepts de l'interactions du rayonnement avec la matière, décries les grandeurs physique et dosimétrique, ainsi que les structures chimiques de l'ADN et l'effet biologique des rayonnements ionisant sur cette molécule.

### I. Classification de rayonnement :

#### I.1. Classification de rayonnement selon la nature physique :

Le rayonnement est le transfert d'énergie dans l'espace, le vide ou la matière, sous deux formes différentes, électromagnétique et particulaire.

##### I.1.1. Les rayonnements électromagnétiques :

Le rayonnement électromagnétique est un rayonnement photonique qu'est un quanta d'énergie sans masse. Selon l'énergie transférée, il existe différentes classes de rayonnement électromagnétique qui définissent le spectre électromagnétique [1] :

**-Le rayonnement gamma :** s'accompagne de la stabilisation des atomes, ne montrant aucun déséquilibre baryonique. Notez qu'en général, la désintégration gamma est soit une désintégration alpha, soit une désintégration bêta. Cela est dû à la recombinaison des nucléons et des charges

**-Les rayons X :** sont similaires aux rayons gamma, sauf que la source de ce rayonnement est différente. En fait, ce dernier est soit dû au freinage des particules bêta dans la matière, soit à des changements dans les niveaux d'énergie des électrons dans les atomes.



**I.1.2. Les rayonnements particuliers :** on distingue deux types :

**I.1.2.1. Les particules chargées légères :**

Ce sont des électrons et ses antiparticules (des positrons). Ils proviennent de la conversion interne  $\beta^+$ ,  $\beta^-$  de l'émission de certains noyaux radioactifs, du mouvement des électrons soit directement par un accélérateur de particules, soit dans un second temps après interactions X ou photons dans la matière, désexcitation électronique par Effet Auger après ionisation ou excitation intermédiaire. Les électrons peuvent donc avoir une origine atomique ou nucléaire.

**I.1.2.2. Les particules chargées lourdes :**

Sous cette étiquette, nous trouvons tous les noyaux subatomiques à haute énergie cinétique. Les noyaux sont sensibles dans certaines réactions nucléaires ou dans les accélérateurs pour gagner des énergies cinétiques élevées. Les particules chargées lourdes sont principalement des ions lourds et des noyaux lourds en tant que produits de fission et de réaction nucléaire, particules alpha ( $\alpha$ ) :  ${}^4\text{He}^{2+}$ , deutérons (d) :  ${}^2\text{H}^+$ , protons (p) :  ${}^1\text{H}^+$ .

Les ions lourds comme ils sont produits artificiellement (accélérateur de particules ou réacteurs nucléaire), ils ont une origine naturelle, c'est le rayonnement cosmique.

L'énergie totale de ces particules est donnée par la relation d'Einstein [2] :

$$E = mc^2 \quad (\text{I.1})$$

Où m est la masse au repos de la particule et c la vitesse de la lumière ou « célérité » ( $3.108 \text{ m. s}^{-1}$ ).

Cette énergie totale peut elle-même être décomposée de la façon suivante [2] :

$$E = mc^2 = T + m_0c^2 \quad (\text{I.2})$$

**I.2. Classification de rayonnement selon les effets :**

**I.2.1. Les rayonnements ionisants :**

Les rayonnements ionisants sont classés selon leur effet sur la matière en deux catégories comme le montre la figure suivante :

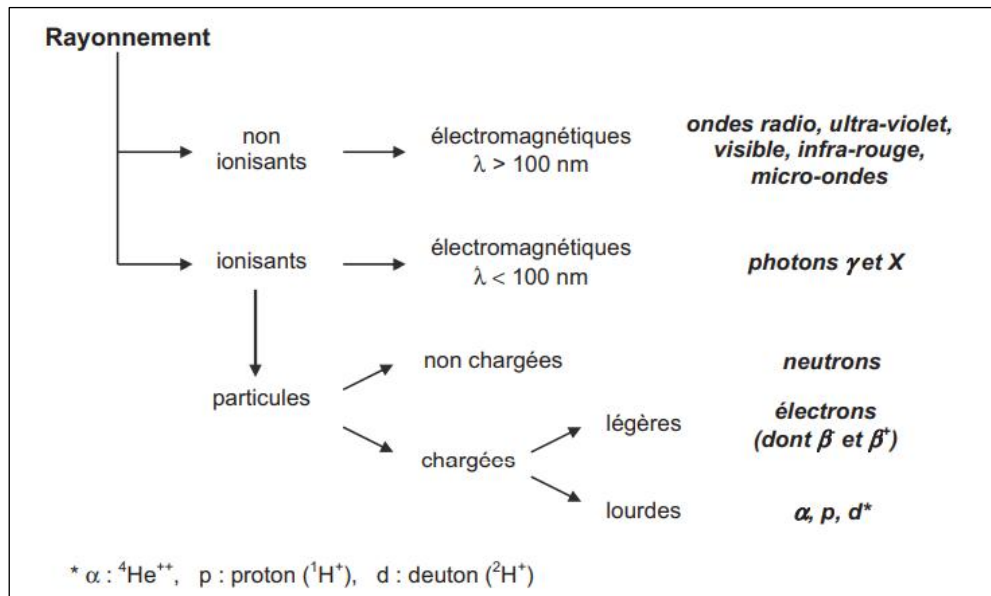


Figure I.1 : Classification des rayonnements [2].

### I.2.1.1. Les rayonnements directement ionisants :

Ils comprennent les particules chargées légères ( $e^-$  et  $e^+$ ), et les particules chargées lourdes ( $H^+$ ,  $\alpha$ ...), qui déposent son énergie au milieu par une seule étape, par le processus d'interaction coulombienne entre la particule incidente et les électrons orbitales [3].

### I.2.1.2. Les rayonnements indirectement ionisant :

Ils comprennent les neutrons et les rayonnements électromagnétiques (photons X, et  $\gamma$ ) qui déposent son énergie au milieu par deux étapes :

- Au premier temps une particule chargée est libérée dans le milieu absorbant (le photon libère un électron), et le neutron libère un proton) [3].
- Dans la deuxième étape, les particules libérées déposent l'énergie au milieu absorbant par des interactions coulombiennes avec les électrons orbitaux des atomes [3].

### I.2.2. Les rayonnements non ionisants :

Un rayonnement non ionisant est un rayonnement dont l'énergie est insuffisante pour ioniser la matière. Le rayonnement non ionisant comprend : les ultraviolets, la lumière visible, le rayonnement infrarouge, les micro-ondes et les ondes radio.

## II. Les types d'interaction rayonnements- matière :

### II.1. Interaction des photons avec la matière :

Lors de l'interaction des photons X et gamma avec la matière, il y a trois types interaction inélastiques : l'effet photoélectrique, l'effet Compton et la production des paires ( $e^-$ ,  $e^+$ ), et interaction un élastique ; la diffusion Thomson-Rayleigh.

#### II.1.1. L'effet photoélectrique :

C'est un phénomène d'absorption totale d'énergie. Le photon incident disparaît après avoir donné toute son énergie à un électron d'une couche interne d'atome du milieu. Si l'énergie transférable est supérieure à l'énergie de liaison des électrons à l'orbital, l'électron éjecté avec une énergie cinétique  $E_c$  égale à la différence entre l'énergie  $E$  du photon incident et son énergie d'extraction  $E_l$  [4,5].

$$E_c = h\nu - E_l \quad (I.3)$$

Après l'ionisation, l'atome suit la réorganisation du cortège électronique pour combler le vide de la couche d'électron expulsé en produisant un photon de fluorescence ou en éjectant un électron d'une couche environnante : c'est l'effet Auger [6].

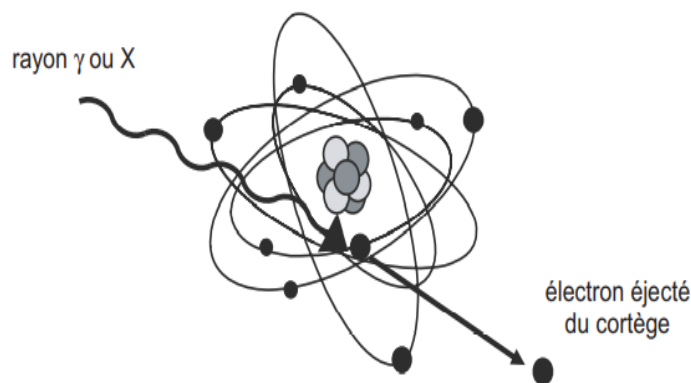


Figure I.2 : l'effet photoélectrique [2].

#### II.1.2. L'effet Compton :

La diffusion Compton est l'interaction de photons avec des électrons faiblement liés à la matière lorsqu'un photon transfère une partie de son énergie à cet électron qui est éjecté par l'énergie cinétique  $E_c$  et un angle variant de 0 à 180° accompagnée de l'émission d'un photon diffusé moins énergétique [7].

L'énergie du photon diffusé est donnée par relation [3,4] :

$$\frac{Ev'}{Ev} = \frac{1}{1 + \alpha (1 - \cos(\theta))} \quad (I.4)$$

$Ev'$  : L'énergie du photon diffusé.

$Ev$  : L'énergie du photon incident.

$\theta$ : angle diffusé.

$$\alpha = \frac{E_0}{m_e c^2} = \frac{E_0}{0.511 \text{ MeV}}$$

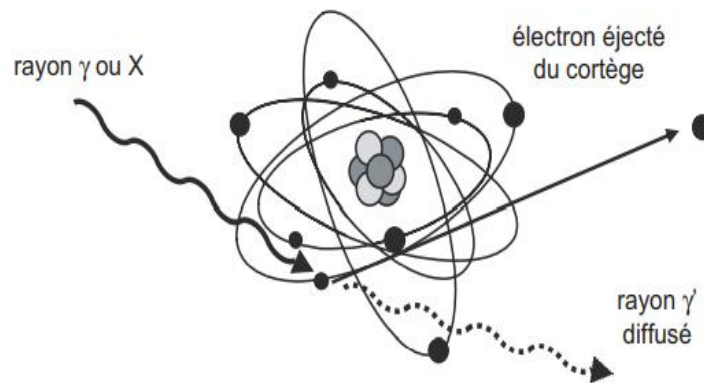


Figure I.3 : l'effet Compton [2].

### II.1.3. Création des paires :

Pour les hautes énergies, la création de paires est le phénomène le plus dominant. Lorsqu'un photon passe à proximité d'un noyau atomique, il peut interagir avec le champ coulombien de noyau par un processus appelé création de paires, à condition que l'énergie de photon dépasse un seuil énergétique égal à 1.02 MeV [8].

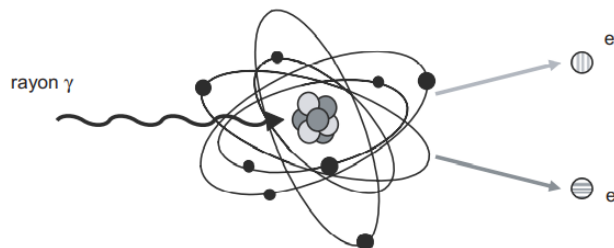


Figure I.4 : la création de paires [2].

Le photon est converti en une paire électron-positon, chacune ayant sa propre énergie cinétique. Le bilan énergétique est [9] :

$$h\nu = T^+ + T^- = m_0c^2 \quad (I.5)$$

Lorsque l'effet de matérialisation déroule dans le champ d'un électron orbital, il y'aura une création de triplets, car l'électron cible est lui-même éjecté avec une énergie considérable. Deux électrons et un positon sont ainsi mis en mouvement. Le seuil d'énergie pour la création de triplets est de  $4m_0c^2$  [10].

#### II.1.4. Diffusion Thomson-Rayleigh :

La diffusion de Rayleigh est une diffusion élastique de photons sur des électrons liée, un phénomène qui se produit lorsqu'un photon passe à proximité d'un électron atomique ou moléculaire lié, ce dernier rayonnant ainsi émettant un photon de même énergie que le photon incident de diffusion à faible angle. Cette diffusion est similaire à la diffusion Thomson sauf que dans ce cas le photon interagit avec des électrons libres (non lié à un atome) [6].

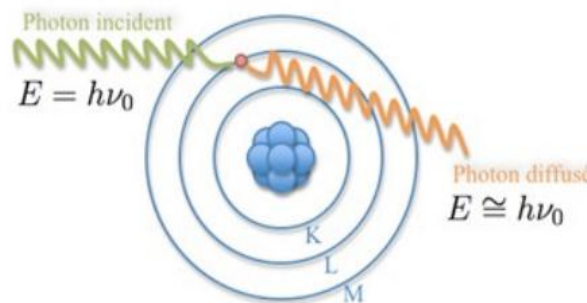
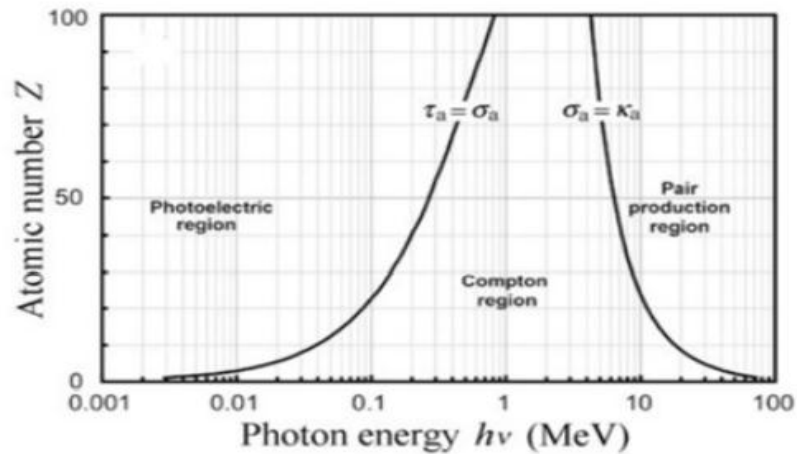


Figure I.5: La diffusion Rayleigh [11].

On résume que, l'effet photoélectrique est important aux basses énergies (inférieures à 100 keV), tandis que l'effet Compton domine aux énergies intermédiaires inférieures à 1,022 MeV, lorsque la création de paires est nulle. Aux hautes énergies ( $E > 1,022$  MeV), l'effet de la production en couple domine comme le montre la figure suivante :



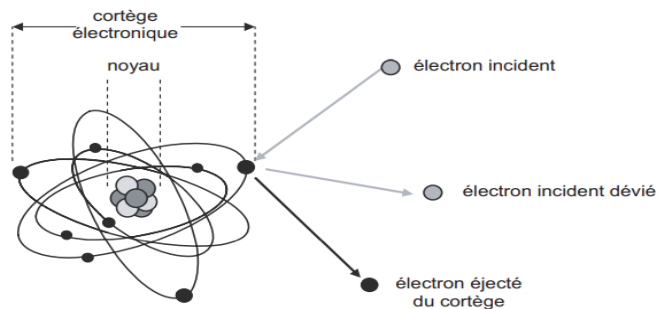
**Figure I.6 :** Représentation de la prédominance relative des trois processus d'interaction photons-matière [2].

## II.2. Interaction particules chargées avec matière :

Lorsqu'elles traversent la matière, les particules chargées interagissent principalement avec les électrons et rarement avec les noyaux atomiques. Lorsque les particules entrent en collision avec des électrons atomiques, elles déposent son énergie selon l'un des phénomènes suivants [12] :

### II.2.1. Ionisation :

L'ionisation des atomes du milieu traversé se produit lorsque l'énergie transférée à l'électron est suffisante pour l'éjecter du cortège électronique de l'atome en formant un ion positif instable. Afin de retrouver une meilleure stabilité, le trou restant sur l'orbitale sera comblé par un électron provenant de la couche électronique supérieure. Ces transformations s'accompagnent de l'émission d'énergie, sous forme de rayons X caractérisé par sa pénétration eux-mêmes, c'est le phénomène de fluorescence X.



**Figure I.7 :** Phénomène d'ionisation [2].

### II.2.2. Excitation :

Si l'énergie cédée par la particule traversant un milieu est inférieure à l'énergie de liaison de l'électron atomique, ce dernier ne sera pas éjecté de l'atome mais le gain d'énergie fera migrer l'électron vers la couche supérieure donc l'atome sera instable. Puis l'atome ou la molécule se d'excitée en émettant un photon qui est généralement absorbé par le milieu.

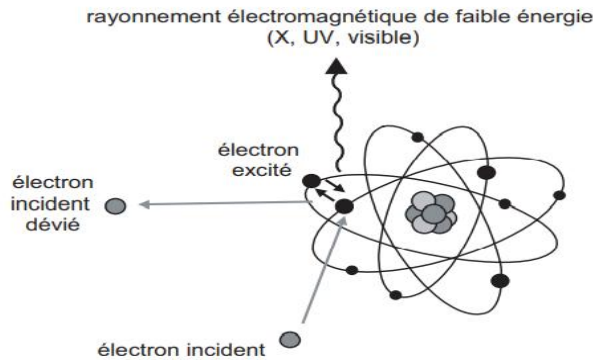


Figure I.8: Phénomène d'excitation [2].

### II.2.3. Rayonnement de freinage :

Les électrons incidents peuvent interagir avec les noyaux des atomes de la substance traversée. Il subit l'influence du champ coulombien pour le noyau : il est alors dévié et cède une partie de son énergie au noyau. Cela se manifeste par une décélération ou un freinage. L'énergie perdue est dégagée sous forme de rayons X, appelés " Bremsstrahlung ". Ce phénomène n'est significatif que dans le cas d'électrons de forte énergie (supérieure à 1 MeV) traversant un matériau composé d'atomes lourds (haut numéro atomique Z) [2].

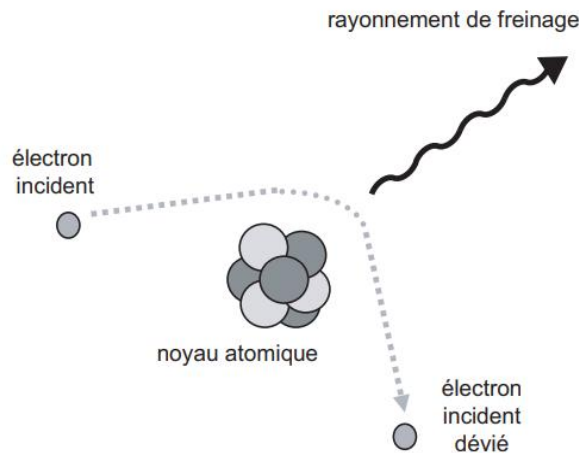


Figure I.9 : Phénomène de freinage [2].

### III. Les grandeurs physiques :

#### III.1. Le coefficient d'atténuation :

Le coefficient d'atténuation linéaire est la probabilité qu'un photon interagisse avec un autre photon par unité de longueur. C'est le résultat de la section efficace divisée par la densité atomique  $n$  (nombre d'atomes par unité de volume) [13] :

$$\mu = n\sigma = \frac{dN}{N dx} \quad (I.6)$$

Le coefficient d'atténuation linéaire a la grandeur de l'inverse d'une longueur : l'intégration de cette relation donne une loi exponentiellement décroissante reliant l'intensité des photons émergeant de l'environnement sans interférer avec l'épaisseur traversée  $x$  [13].

$$N = N_0 e^{-\mu x} \quad (I.7)$$

Afin de prendre en compte la masse volumique d'une substance, il est plus pratique d'utiliser la notion de coefficient d'atténuation massique  $\mu_m$  qui est donné par la relation :

$\mu_m = \mu / \rho$  où  $\rho$  est la masse volumique de la substance.

Le coefficient d'atténuation massique est indépendant de l'état solide, liquide ou gazeux d'une substance. Dans ce cas, la loi d'atténuation s'écrit [6] :

$$N = N_0 e^{-\frac{\mu}{\rho} x} \quad (I.8)$$

#### III.2. Le pouvoir d'arrêt (S) :

L'ionisation et l'excitation atomique se traduisent par une perte d'énergie par collision dans le milieu traversé. On parle de pouvoir d'arrêt  $S$  exprimé en  $J.m^{-1}$  ou  $MeV.cm^{-1}$  qui représente l'énergie perdue par une particule chargée  $dE$  par unité de longueur de la trajectoire parcourue  $dx$  [14] :

$$S = -\frac{dE}{dx} \quad (I.9)$$

#### III.3. Transfert d'énergie linéique (TEL) :

Tout au long de son parcours dans la matière, une particule chargée est soumise à une série d'interactions au cours desquelles elle transfère une partie de son énergie jusqu'à son arrêt



total ; cette action est exprimée par le transfert d'énergie linéique TEL généralement exprimé en [KeV/ $\mu\text{m}$ ], qui est une mesure de la densité d'ionisation moyenne le long de la trajectoire de la radiation. Dans un milieu donné, le TEL est définie par l'énergie moyenne localement transmise  $dE$  et la distance  $dl$  traversée par la particule, selon la relation [15,16] :

$$TEL = \frac{dE}{dl} \quad (\text{I.10})$$

#### III.4. Le Parcours (R) :

Le parcours est La distance au-delà de laquelle des particules sont totalement absorbées par la matière [17].

$$R = \int_0^R dx \quad (\text{I.11})$$

R : s'exprime en cm

#### III.5. Le flux :

##### III.5.1. Le flux particulaire :

Le flux de particules  $\dot{N}$  exprimé en  $\text{s}^{-1}$  est le quotient de  $dN$  par  $dt$ , où  $dN$  représente le nombre de particules émises, transférées ou reçues pendant un intervalle de temps  $dt$  [14,17] :

$$\dot{N} = \frac{dN}{dt} \quad (\text{I.12})$$

##### III.5.2. Le flux énergétique :

Défini comme étant le quotient  $dE$  Par  $dt$ , où  $dE$  est l'énergie des particules incidentes, et  $dt$  l'intervalle de temp [17] :

$$\dot{E} = \frac{dE}{dt} \quad (\text{I.13})$$

#### III.6. La fluence

##### III.6.1. La fluence particulaire :

La fluence  $\Phi$  exprimée en  $\text{m}^{-2}$  est le quotient de  $dN$  par  $da$ , où  $dN$  représente le nombre de particules traversant une sphère élémentaire de section diamétrale  $da$  [17] :

$$\Phi = \frac{dN}{da} \quad (\text{I.14})$$

L'utilisation d'une sphère de section diamétrale da exprime de manière simple le fait qu'on considère une zone da perpendiculaire à la direction de chaque particule. Cette grandeur indépendante de l'angle incident de radiation est calculable si on connaît l'activité, le taux d'émission, le temps d'exposition et la position de la source.

### III.6.2. La fluence énergétique :

Est définie comme étant le quotient dE fonction de da, où dE est l'énergie des particules incidentes, et da unité de surface [17] :

$$\Psi = \frac{dE}{da} \quad (I.15)$$

## IV. Les grandeurs dosimétriques :

### IV.1. La Dose absorbée :

La Dose absorbée D est la quantité d'énergie absorbée par unité de masse de matière irradiée [18] :

$$D = \frac{dE}{dm} \quad (I.16)$$

### IV.2. La dose équivalente :

La dose équivalente,  $H_T$  permet de mesurer les effets biologiques sur un tissu ou un organe soumis à une exposition par un type de rayonnement ionisant. En effet, les dégâts s'observent sur un même tissu ou organe varient selon la nature du rayonnement. La dose équivalente est obtenue en multipliant la dose absorbée dans un tissu ou par un facteur de pondération [18] :

$$H_T = \sum W_R \times D_{T,R} \quad (I.17)$$

Son unité est le sievert [Sv].

### IV.3. La dose efficace :

La dose efficace  $E_{eff}$  est définie par la somme pondérée des doses équivalentes reçues par les organes et tissus du corps humain considérés comme sensibles à l'induction d'effets Stochastiques et pouvant engendrer des risques de cancers radio-induits :

$$E = \sum W_T \times H_{T,R} \quad (I.18)$$

Son unité est le sievert [Sv][18].

Terme (Symbole)	Définition	Unité	
Dose absorbée (D)	$D = \frac{dWa}{dm}$	Gray (Gy)	=1J.Kg <sup>-1</sup>
Dose équivalente (H <sub>T,R</sub> )	$H_T = \sum W_R \times D_{T,R}$	Sievert (Sv)	=1J.Kg <sup>-1</sup>
Dose efficace (E)	$E = W_T \times H_T$	Sievert (Sv)	=1J.Kg <sup>-1</sup>

**Tableau I.1** : Résumé des termes- définition-unités.

## V. Structure d'ADN :

L'Acide Désoxyribonucléique (ADN) est un composant essentiel dans les cellules vivantes, il porte l'information génétique des organismes. L'ADN est une macromolécule polymérique, il est constitué de nombreuses petites molécules assemblées de façon répétitive formée par l'association de longue chaîne de petites molécules comme les sucres, constituée de milliards d'atomes [19,6].

L'ADN est une double hélice composée de deux brins enroulés l'un autour de l'autre. Chaque brin est composé d'une succession de nucléotides qui sont un assemblage de trois molécules : un groupement phosphate (H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>), un sucre (C<sub>5</sub>H<sub>10</sub>O<sub>4</sub>) et une base azotée. Chacune de ces chaînes est constituée d'un enchaînement de bases dites puriques : Guanine (G : C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>N<sub>5</sub>O), Adénine (A : C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>N<sub>5</sub>) et pyrimidiques : Cytosine (C : C<sub>4</sub>H<sub>5</sub>N<sub>3</sub>O) Thymine (T : C<sub>5</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>). Les bases (A-T) et (C-G) sont complémentaires et cette association est assurée respectivement par deux et trois liaisons hydrogène (voir la Figure (I.9)) [19,20 ,21,22 ,23,24].

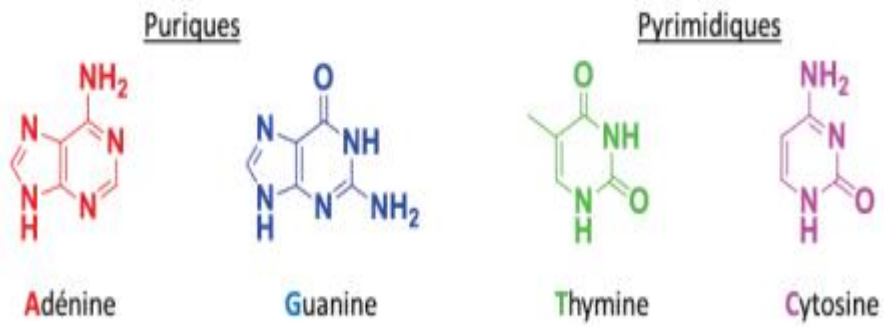


Figure I.10: Structure des bases azotées [22].

La figure (I. 10) représente la structure globale de l'ADN.

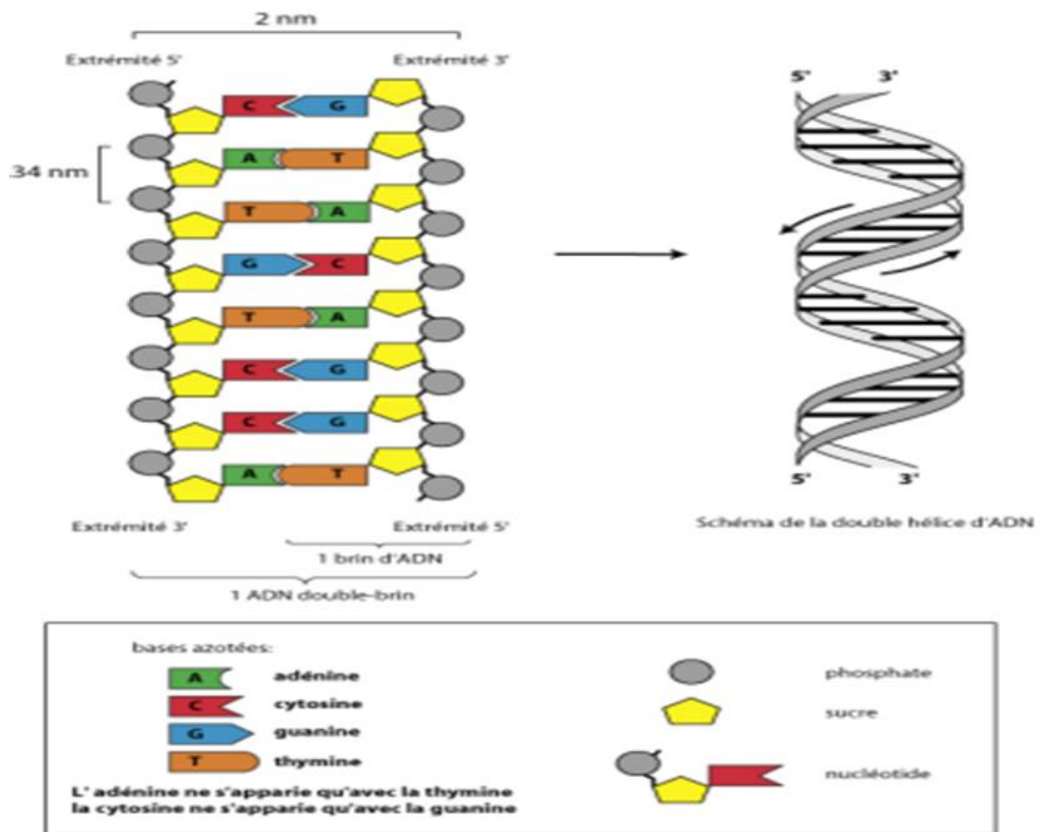


Figure I.11 : structure chimique de l'ADN [19].

## VI. Les effets biologique des rayonnements ionisants sur l'ADN :

Les dommages radio induits d'ADN peuvent être classés selon deux groupes [20] :

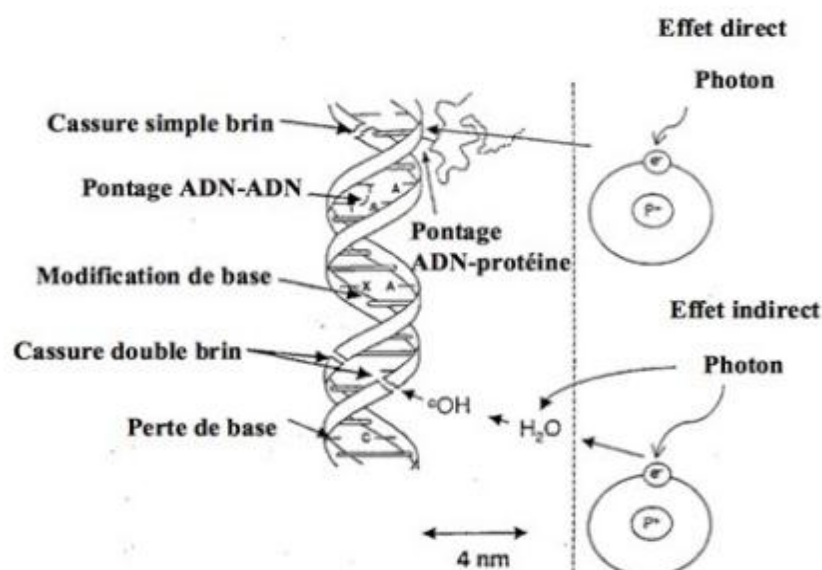
- Des dommages structuraux : ce sont les cassures des liaisons phosphodiester soit cassures simples ou double brin (CSB, CDB) et les pontages (ADN-protéine ou ADN-ADN)
- Changements dans l'information : consiste aux modifications chimiques des bases azotées d'ADN.

• **La coupure simple brin (CSB)** : La plupart des ruptures simples d'une chaîne d'ADN (CSB) radio-induits sont produits sous la liaison phosphodiester, souvent à la suite de l'arrachement d'un atome d'hydrogène du sucre par le radical hydroxyle [25,26].

• **Les coupures double brin (CDB)** : résultent de la rupture des deux chaînes de l'ADN. Ce type de dommage bien que plus rare que les cassures simples brins, est considéré comme l'altération la plus délétère pour l'ADN [25,26].

• **Les pontages ADN-protéines** : résultent de l'apparition de liaisons covalentes entre les bases de l'ADN, l'ADN et les histones ou d'autres protéines environnantes. Ces dommages sont principalement dus à l'action du radical hydroxyle ( $\text{OH}^{\bullet}$ ). Bien que ces pontages restent rares [25,27].

• **Les modifications chimiques des bases d'ADN** : La structure des bases se modifie à cause d'interaction des radicaux libres  $\text{OH}^{\bullet}$  dues aux radiolyses de l'eau avec les bases (puriques ou pyrimidiques) par l'arrachement d'un atome d'Hydrogène. Les bases pyrimidiques sont plus radiosensibles que les bases puriques. Les effets directs produisent également les mêmes altérations de bases mais dans des proportions différentes [19,28].



**Figure I.12** : Représentation schématique des principaux dommages de l'ADN produits par des effets directs et indirects [20].

## VII. ADN plasmidique :

L'ADN plasmidique purifié peut être utilisé dans une grande variété d'applications radiologie [23], Un ADN plasmidique est une petite molécule d'ADN double brin trouvée souvent dans l'état circulaire, bien qu'occasionnellement, il existe des plasmides linéaires d'ADN à double brin que l'on trouve dans beaucoup de souches bactériennes comme *Escherichia coli* (E. Coli), Ce dernier a été défini comme l'un des êtres vivants les plus élémentaires et les mieux compris généralement utilisés dans les études de recherche [18].

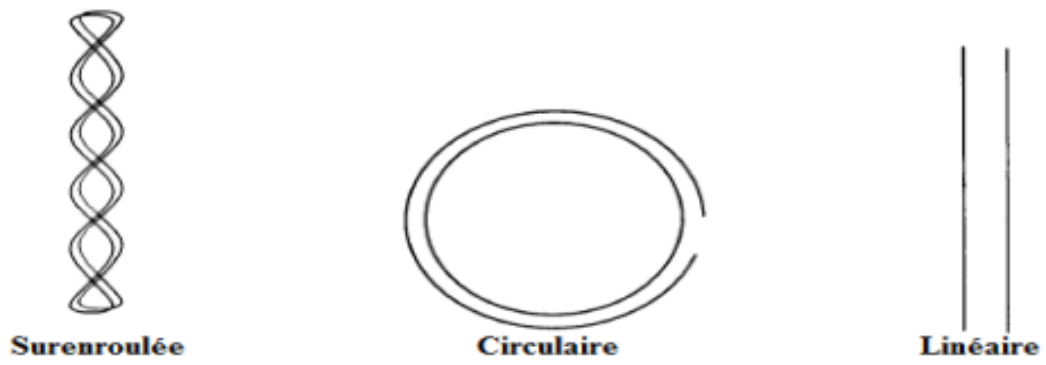
Les différentes variétés d'ADN plasmidique purifié d'*Escherichia coli* ainsi que leurs caractéristiques majeures sont [20] :

- **PBR322** : se caractérise par 4361 paires de bases et une masse moléculaire de  $2,8 \times 10^6$  Da [29].
- **PUC19/18** : se caractérise par 2686 paires de bases ayant une masse moléculaire de  $1,75 \times 10^6$  Da [30,31].
- **PUC21** : se caractérise par 3266 paires de bases avec une masse moléculaire de  $2,13 \times 10^6$  Da [29].

L'une des trois plasmides cités précédemment peut se trouver sous l'une de ses formes topologiques :

- **La forme surenroulée (S)** qui est la forme native : dans cette topologie non endommagée l'un des deux brins d'ADN présente des tours supplémentaires d'enroulement par rapport à l'autre, le plasmide est dit surenroulé
- **La forme circulaire (C)** : la rupture de l'un des deux brins de l'ADN surenroulé rend le plasmide relâché encore appelé circulaire ou relaxé.
- **La forme linéaire (L)** : cette forme est obtenue par la rupture des deux brins de l'ADN surenroulé, l'ADN est devenu ouvert, que l'on appelle linéaire [6].

On représente ces trois formes sur la figure (I.12).



**Figure I.13 :** Les trois formes de l'ADN plasmidique [6].

***Chapitre II : Méthode de  
Simulation Monte Carlo***



**Introduction :**

La simulation Monte Carlo (MC) a été proposée par les scientifiques du projet Manhattan lors de la deuxième guerre mondiale et fait allusion aux jeux de hasard pratiqués à Monaco. Parmi les pionniers des méthodes MC nous retrouvons John von Neumann et Stanislas Ulam. Les méthodes MC sont aujourd'hui utilisées pour simuler des phénomènes physiques complexes dans plusieurs domaines scientifiques et appliqués comme radioactivité, physique des hautes énergies. La méthode Monte Carlo est une méthode d'approximation, au sens statistique du terme, elle représente les techniques permettant d'évaluer une quantité déterministe avec des paramètres ou des entrées stochastiques [32]. Dans nos travaux, nous nous intéressons à l'un des codes Monte Carlo, qui est le code de transport des particules et des ions lourds, "PHITS". Dans ce chapitre, nous présenterons les principes de base de la méthode de Monte Carlo et quelques types de ses codes, puis nous traiterons de la définition et de la description du code de simulation de Monte Carlo PHITS [33].

**I. Généralités sur Simulation Monte Carlo et principe :**

La méthode Monte-Carlo (MC) a vu son essor à partir de la fin de la seconde guerre mondiale essentiellement dans le cadre du projet "Manhattan" à Los Alamos Concernant le développement de l'arme nucléaire (pour l'étude de la diffusion des neutrons sur un matériau fissile), Nous appelons la méthode de Monte Carlo toute méthode de calcul de la valeur en utilisant des procédures stochastiques [34,33], c'est-à-dire des méthodes statistiques basées sur le tirage des nombres aléatoires suivant des lois de probabilité qui décrivent les processus physiques mis en jeu. La nature stochastique des processus d'émission, de transport et de détection fait que les méthodes Monte Carlo soient bien adaptées à la physique médicale nucléaire. But de cette méthode d'imiter le comportement d'un système réel en toute rigueur. La simulation de chaque étape d'un processus physique (génération d'une particule, interaction de la particule) nécessite un tirage d'une série de nombres aléatoires. Ces algorithmes possèdent le désavantage qu'ils demandent des temps de calculs très importants [33].

Sachant que la simulation de la transmission des photons est différente à d'électrons, les deux processus sont détaillés ci-dessous :

- **Simulation de transport de photons :**

La modélisation de la diffusion des photons par la méthode de Monte Carlo est une approche flexible mais rigoureuse pour simuler le transport de photons exprimé en distributions de probabilité décrivant l'amplitude du pas de mouvement du photon entre elles Les sites d'interaction et les angles de déviation dans le trajet des photons lorsqu'un La diffusion se produit.

Le suivi des évènements se fait par ordre chronologique [35] :

1. Échantillonnage du libre parcours moyen.
2. Échantillonnage des sections efficaces différentielles et totales.
3. La nature de l'interaction, la direction et la perte d'énergie suite à l'interaction.

- **Simulation de transport des électrons :**

Dans le cas de transport des électrons, lorsque l'énergie augmente au-dessus de quelques dizaines de KeV, le grand nombre de collisions que peut subir un électron, rend irréaliste de simuler toutes les interactions physiques. Il est nécessaire d'échantillonner son trajet par pas, c'est la méthode de « l'histoire condensée » qui est la base de tous les codes Monte Carlo utilisés en physique médicale [36, 37]. Cette technique peut être divisée en deux catégories, Selon Berger [38] :

**Classe I :** Toutes les collisions sont à collectionner, avec l'utilisation d'une gamme distincte de longueurs de pas, à la fin de l'échantillonnage les interactions sont aléatoires. La production de particules secondaires est prise en compte globalement après chaque pas en échantillonnant une distribution de perte d'énergie de l'électron primaire. MCNP est l'un des codes de classe I.

**Classe II :** Cette classe est basée sur une procédure mixte où les collisions "faibles", tandis que les collisions "catastrophiques" sont explicitement simulées. GEANT4, PENELOPE et PHITS sont des exemples de simulations MC de classe II.

## II. Exemples des codes de simulation Monte Carlo :

Les codes Monte-Carlo permettent de simuler des configurations plus complexes et plus variées mais nécessitent des temps de calculs bien plus grands Par la suite, une brève description des codes Monte-Carlo les plus répandus en physique Médicale :

### II.1. GEANT4, GEANT4-ADN :

La première version de GEANT a été créée en 1974. Il est un outil de calcul conçu pour permettre aux physiciens de simuler la réponse des détecteurs de particules lors d'une expérience de physique des hautes énergies. Il peut couvrir des gammes d'énergie allant du keV jusqu'à des centaines de GeV, nous l'avons adopté pour simuler l'interaction des photons avec la matière. Le rôle majeur du programme GEANT est donc de simuler le passage des particules dans la matière (Electrons, photons, noyaux radioactifs). C'est la raison pour laquelle il a trouvé aujourd'hui d'autres applications en dehors du domaine de la physique des hautes énergies essentiellement en biologie, médecine, radioprotection et astronomie. La dernière version GEANT4 a été développée par le Conseil Européen de Recherche Nucléaire (CERN), Ce logiciel Était utilisé d'abord pour la simulation de grands détecteurs de particules

(ATLAS). Grace aux différentes améliorations apportées, son utilisation s'est élargie à plusieurs applications dans le domaine de la physique médicale (simulation de faisceaux de particules utilisés en radiothérapie). La programmation se fait à l'aide d'un langage orienté objet (C++), toutes ces caractéristiques font de GEANT4 à l'heure actuelle un outil de simulation performant (un code complet, précis et robuste) ambitieux et évolutif [39,35,40]. A été développé l'outil de simulation Monte-Carlo généraliste Geant4 pour obtenir d'une plateforme de calcul permettant d'estimer les effets des rayonnements ionisants sur l'ADN s'appelle Geant4-DNA. Ses caractéristiques : gamme énergétique entre KeV et GeV et les particules que je peux étudier sont Electron, protons, alpha, quelques ions [33]. Geant4-DNA vise à simuler les trois étapes principales de l'interaction des particules avec le vivant représenté dans la première étape physique son principal objectif est de développer des processus physiques et des modèles, deuxième étape physico-chimique et chimique. Son but est la modélisation de la production, diffusion et réactions croisées de nombreuses espèces moléculaires et les radicaux libres créés dans les milieux biologiques par l'étape précédente, l'étape finale biologique vise à modéliser les interactions des particules et des espèces chimiques avec le génie biologique et à proposer des modèles pour réparer les dommages causés par les rayonnements [41].

### II.2. MCNP :

MCNP (Monte Carlo N Particules) est un code capable de simuler le transport des particules neutres (neutrons, photons,) et les particules chargées (électrons, les positons, protons, d'ions lourds) à travers la matière en utilisant la méthode Monte-Carlo pour des énergies de quelques KeV. Ce code est élaboré au Los Alamos National Laboratory aux Etats-Unis. L'algorithme de transport des électrons dans le code MCNP est basé sur le code Monte-Carlo ETRAN. Le code traite une configuration tridimensionnelle arbitraire de matériaux dans des cellules géométriques délimitées par des surfaces du premier et du deuxième degré. L'utilisation de MCNP est très polyvalente, mais est plus spécifiquement utilisée pour les calculs de réacteurs ou toute autre installation nucléaire et la radioprotection [33,41,47].

### II.3. EGS :

Le système de code EGS (Electron Gamma Shower) est un progiciel polyvalent pour simuler le double transport Monte Carlo d'électrons et de photons en génie des particules aléatoires avec des énergies supérieures à quelques kilovolts jusqu'à plusieurs GeV [43]. Cette technologie de correction a été développée dans une nouvelle version (EGS5). Introduit dans le code PHITS. Enfin, il est recommandé d'utiliser PHITS avec les modèles physiques EGS5

et les bibliothèques de données à utiliser lors de la simulation du transport d'électrons avec la version mise à jour de PHITS (Ver.3.16) [44].

## II.4. PHITS :

### II.4.1. Définition de PHITS :

Le code PHITS développé à la collaboration de plusieurs instituts Japonais et Européens. Ce code est l'un des codes de simulation Monte Carlo généralement utilisé en deux ou trois dimensions, il peut transporter toutes types d'hadrons et d'ions lourds et il peut également simuler le transport des noyaux et d'autres particules dans des géométries compliquées avec une énergie de quelque eV jusqu'à 1TeV est capable de calculer les flux, les doses, les distributions de dépôt d'énergie et de nombreux autres observables. Le code PHITS est utilisée dans divers domaines de recherche tels que la radiothérapie, les rayonnements spatiaux, la physique médicale et d'autre nombreux autres domaines liés aux phénomènes de transport des particules et des ions lourds. En cours il peut être installer sur Windows, Mac et les plateformes Linux. Malgré les développements survenus dans le code, ils sont toujours en train de le développer pour la simulation de tous les types de particules avec des gammes de haute énergie. Le code PHITS est écrit en Fortran [45,46,47].

### II.4.2. Structure du code :

#### II.4.2.1. Le fichier d'entrée (input) :

Le fichier (input) est la base du code PHITS se composé trois grandes sections principales, parmi ces sections principales suivante : la section [Titre et Paramètres], la section [géométrie] et la section [Tallies][45]. Le fichier d'entrée (.inp) prend la forme suivante :

```
[Title]
...
[Parameters]
para1 = file.name
para2 = file.name
...
[Source]
...
[Material]
...
[Surface]
Surface number      transform number      surface symbol      surface definition
...
[Cell]
Cell number  material number  material density  cell definition  cell parameter
...
```

Tallies

...g

[End]

## II.4.2.2. Les sections de PHITS

### II.4.2.2.1. Section titre et paramètres :

Section [Titre] ceci est la première ligne du fichier input, suivi par la section [paramètres] cette section contient plusieurs paramètres qui contrôlent notre simulation parmi ces paramètres : il y a des paramètres qui vérifient la géométrie en 2D ou bien 3D et d'autres paramètres comme [47,41] :

- ictl = 8 ou 11 : pour voir la géométrie en 2 et 3 dimensions.
- Maxcas = 100000 : spécifier le Numbers des histoires (événements)
- emin =(i=12,13) Énergie de coupure pour les électrons (i=12), les positrons (i=13) [MeV]. (D=1.0e-3) (i=14) Énergie de coupure pour les photons [MeV].
- File (6) = phits output contient tous les données cités dans le fichier d'entrée.

### II.4.2.2.2. Section géométrie :

Pour décrire une géométrie de calcul, il faut choisir entre le système CG et le système GG. Il n'est pas possible de se connecter aux deux systèmes en même temps. Grâce à laquelle les géométries tridimensionnelles (3D) ou deux dimensionnelles (2D) sont déterminées selon le fichier input. Cette section se décompose en quatre sections complémentaires, chaque section contient des paramètres spéciaux. Les 4 sections utilisées pour définir la géométrie sont [47] :

- **Section [source]** : est utilisée pour déterminer la production des particules, elle est définie par plusieurs paramètres exemple : **s-type=N** : représente la forme de la distribution de la source déterminée où chaque nombre présente une géométrie différente (s-type=1 : la source a une forme cylindre (ou cercle, pénils)). Le type de particules source définies par **proj= électron** par exemple. Il faut montrer le type de particule incident avec son énergie  $e_0$  (ce dernier peut être continu ou discret), la direction de particule source et la localisation de la source [41,42].
- **Section [Matériel]** : dans cette section nous définissons le nombre de matériau, son nom et son densité en  $g/cm^3$  puis les ratios de ces compositions ou bien le pourcentage atomique de chaque composant.
- **Section [Surface]** : dans cette section nous définissons le nombre de surface, sa description et la géométrie de chaque matériel (rcc, rpp ...).
- **Section [Cell]** : cette section relie à la section précédente et spécifie le nombre des cellules, le nombre de matériau et la densité, il faut citer :

- Le numéro de la cellule.
- Le numéro de matériau qui remplit la cellule (le même nombre déclaré dans la section [Matériel]).
- La densité de matériau (un signe (+) si elle est identifiée par la densité atomique ( $10^{24}$  atomes/cm<sup>3</sup>) ou un signe (-) en cas de densité massique (g/cm<sup>3</sup>). Ce nombre est absent si la cellule est vide.
- Définition de la cellule par les numéros de surface déclarés dans la section [surface].

Les tableaux suivants représentent les différentes géométries citées dans la section [surface] :

Surface Symbol	Type	Explanation	Equation	Parameters
P	plane	multi-purpose	$Ax + By + Cz - D = 0$	$A, B, C, D$
PX		vertical with X-axis	$x - D = 0$	$D$
PY		vertical with Y-axis	$y - D = 0$	$D$
PZ		vertical with Z-axis	$z - D = 0$	$D$
P	plane	defined by 3 coordinates		$x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, x_3, y_3, z_3$
SO	sphere	origin is center	$x^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$	$R$
S		multi-purpose	$(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2 - R^2 = 0$	$x_0, y_0, z_0, R$
SX		center on X-axis	$(x - x_0)^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$	$x_0, R$
SY		center on Y-axis	$x^2 + (y - y_0)^2 + z^2 - R^2 = 0$	$y_0, R$
SZ		center on Z-axis	$x^2 + y^2 + (z - z_0)^2 - R^2 = 0$	$z_0, R$
C/X	cylinder	parallel with X-axis	$(y - y_0)^2 + (z - z_0)^2 - R^2 = 0$	$y_0, z_0, R$
C/Y		parallel with Y-axis	$(x - x_0)^2 + (z - z_0)^2 - R^2 = 0$	$x_0, z_0, R$
C/Z		parallel with Z-axis	$(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 - R^2 = 0$	$x_0, y_0, R$
CX		on X-axis	$y^2 + z^2 - R^2 = 0$	$R$
CY		on Y-axis	$x^2 + z^2 - R^2 = 0$	$R$
CZ		on Z-axis	$x^2 + y^2 - R^2 = 0$	$R$
K/X	cone	parallel with X-axis	$\sqrt{(y - y_0)^2 + (z - z_0)^2} =  k  (x - x_0) = 0$	$x_0, y_0, z_0,  k , k$
K/Y		parallel with Y-axis	$\sqrt{(x - x_0)^2 + (z - z_0)^2} =  k  (y - y_0) = 0$	$x_0, y_0, z_0,  k , k$
K/Z		parallel with Z-axis	$\sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2} =  k  (z - z_0) = 0$	$x_0, y_0, z_0,  k , k$
KX		on X-axis	$\sqrt{y^2 + z^2} =  k  (x - x_0) = 0$	$x_0,  k , k$
KY		on Y-axis	$\sqrt{x^2 + z^2} =  k  (y - y_0) = 0$	$y_0,  k , k$
KZ		on Z-axis	$\sqrt{x^2 + y^2} =  k  (z - z_0) = 0$	$z_0,  k , k$
				$k$ is $\pm 1$ or unspecified
SQ	ellipse, hyperboloid, paraboloid	parallel with X-, Y-, or Z- axis	$A(x - x_0)^2 + B(y - y_0)^2 + C(z - z_0)^2 + 2D(x - x_0) + 2E(y - y_0) + 2F(z - z_0) + G = 0$	$A, B, C, D, E, F, G, x_0, y_0, z_0$
GQ	cylinder, cone, ellipse, hyperboloid, paraboloid	non parallel with X-, Y- and Z-axis	$Ax^2 + By^2 + Cz^2 + Dxy + Eyz + Fzx + Gx + Hy + Jz + K = 0$	$A, B, C, D, E, F, G, H, J, K$
TX	ellipse torus torus	parallel with X-, Y-, or Z-axis	$\frac{(x - x_0)^2}{B^2} + (\sqrt{(y - y_0)^2 + (z - z_0)^2} - A)^2 / C^2 - 1 = 0$	$x_0, y_0, z_0, A, B, C$
TY			$\frac{(y - y_0)^2}{B^2} + (\sqrt{(x - x_0)^2 + (z - z_0)^2} - A)^2 / C^2 - 1 = 0$	$x_0, y_0, z_0, A, B, C$
TZ			$\frac{(z - z_0)^2}{B^2} + (\sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2} - A)^2 / C^2 - 1 = 0$	$x_0, y_0, z_0, A, B, C$

Tableau II.1 : des surfaces exprimées par des équations [47].

Symbol	Type	Parameters	Explanation
BOX	Optional BOX (all angles are 90°)	$x_0, y_0, z_0,$ $A_x, A_y, A_z,$ $B_x, B_y, B_z,$ $C_x, C_y, C_z$	Base point coordinate Vector from base point to first surface. Vector from base point to second surface. Vector from base point to third surface.
RPP	Rectangular solid (Each surface is vertical with $x, y, z$ axes)	$x_{\min}, x_{\max},$ $y_{\min}, y_{\max},$ $z_{\min}, z_{\max}$	Minimum and Maximum of $x$ . Minimum and Maximum of $y$ . Minimum and Maximum of $z$ .
SPH	Sphere (the same with general sphere S)	$x_0, y_0, z_0,$ $R$	Center coordinate. Radius.
RCC	Cylinder	$x_0, y_0, z_0,$ $H_x, H_y, H_z,$ $R$	Center coordinate of bottom face. Height vector from center of bottom face to that of top face. Radius.
RHP or HEX	Optional hexagonal prism Prism	$x_0, y_0, z_0,$ $H_x, H_y, H_z,$ $A_x, A_y, A_z,$ $B_x, B_y, B_z,$ $C_x, C_y, C_z$	Base point coordinate. Height vector from base point. Vector from base point to first surface. Vector from base point to second surface. Vector from base point to third surface.
REC	Right elliptical cylinder	$x_0, y_0, z_0,$ $H_x, H_y, H_z,$ $A_x, A_y, A_z,$ $B_x, B_y, B_z$	Center coordinate of bottom face. Height vector from center of bottom face ( $H$ ). Major axis vector of ellipse orthogonal to $H$ ( $A$ ). Minor axis vector of ellipse orthogonal to $H$ and $A$ ( $B$ ).
TRC	Truncated right-angle cone	$x_0, y_0, z_0,$ $H_x, H_y, H_z,$ $R_1,$ $R_2$	Center coordinate of bottom face of cone. Height vector from center of bottom. Radius of bottom face. Radius of top face.
ELL	Ellipsoid of revolution (Spheroid)	If $R > 0,$ $x_1, y_1, z_1,$ $x_2, y_2, z_2,$ $R$  If $R < 0,$ $x_0, y_0, z_0,$ $A_x, A_y, A_z,$ $R$	Coordinate of first focus. Coordinate of second focus. Radius of major axis.  In this case, the ellipsoid formed by a rotation on the major axis. The major axis can be set to be shorter than the minor axis. Center coordinate of ellipsoid. Major axis vector. Radius of minor axis.
WED	Wedge	$x_0, y_0, z_0,$ $A_x, A_y, A_z,$ $B_x, B_y, B_z,$ $H_x, H_y, H_z$	Coordinate of top. Vector to first side of triangle ( $A$ ). Vector to second side of triangle ( $B$ ). Height vector ( $H$ ).

Tableau II. 2: macro body [47].

#### II.4.2.2.3. Section Tallies :

PHITS fait la simulation de parcours de chaque particule en utilisant la méthode Monte Carlo. L'utilisateur peut estimer une variété d'informations sur le comportement moyen de ces particules en calculant diverses quantités comme le flux, la dose et la déposition d'énergie à l'aide des fonctions d'estimateur de « tally » mises en œuvre, dont chaque « tally » possède ces propres paramètres de calcul. Deux types de « tallies » sont implémentés dans PHITS, l'un pour visualiser la géométrie PHITS et l'autre pour le calcul des quantités physiques. On mentionne quelque tallies [47] :

- **[T-Track]** : plus le pouvoir de calculer la distance parcourue en (cm) dans certaines régions, ce tally peut également déduire la fluence particulaire ( $\text{cm}^{-2}$ ) en divisant la distance parcourue par le volume de la région.
- **[T-cross]** : ce tally calcule la fluence traversant certaine surface.
- **[T-deposit]** : ce tally estime la déposition d'énergie dans certaines régions.

- **[T-product]** : Ce tally donne les particules secondaires créés dans certaine région et comptabilise les sources des particules. Alors, une distribution énergétique ou temporelle des particules secondaires peut être obtenue.
- **[T-LET]** : Ce tally peut être utilisé pour obtenir des informations sur la distance parcourue et la dose en fonction de transfert linéique d'énergie.
- **[T-3dshow]** : visualisation tridimensionnelle de la géométrie. Ce tally peut être généré sans calcul du transport en utilisant l'option `icntl=11` dans la section [paramètres].
- **[T-Volume]** : Ce tally est fonction de calcul automatique pour obtenir les volumes de chaque cellule.

Pour définir n'importe quel « tally », il faut déterminer :

- La quantité physique à simuler (type de « Tally »).
- La maille géométrique où le processus physique ait lieu. Elle peut prendre quatre formes. On écrit : **mesh = [reg, r-z, xyz, tet]**.
- Le type de la particule à simuler : on écrit : **part=proton, neutron...etc.**
- L'unité de calcul : on écrit : **unit=nombre (1, 2,3...)**
- La forme de sortie (output) : la valeur de l'axe X qui décrit la forme de sortie (output) peut prendre différentes formes (p.ex. eng, reg, xy, xz...etc.). Le type de l'axe dépend de type de tally et de la maille géométrique [48]. On écrit : **axis = eng, reg, xy,xz...etc.**

Les résultats finaux de « tally » sont inscrits sur un fichier texte. Dans le même temps, PHITS génère un fichier EPS (Enhanced PostScript), qui peut être affiché sur le moniteur sous forme graphique, par l'utilitaire graphique **ANGEL** inclus dans PHITS. Cette fonction peut être utilisée même en période d'exécution du calcul. Ainsi, l'utilisateur peut vérifier immédiatement comment le calcul se déroule et comment les statistiques des quantités de « tallies » augmentent sur son moniteur pendant le calcul [49].

Le fichier de sortie (output) rassemble tout ce que vous mettez dans Le fichier d'entrée (input) en détail et chaque « tally » spécifique par fichier (output).

### III. Difficultés de code PHITS :

- Ne peut pas calculer Les dimensions nanoparticule.
- Manque de clarté ou manque d'apparence des résultats des énergies inférieures à eV (Ne pas donner des résultats des énergies inférieures à eV).
- La période de calcul prend beaucoup de temps, jusqu'à plusieurs jours, semaines et plus, selon les données (chaque fois que c'est les nombres d'évènement grande prendra un grand temps).



- Une simple erreur dans les données d'entrée conduit à la perturbation du code.
- Difficulté à savoir sur les milieux qui contiennent à plusieurs matériaux.

# *Chapitre III : simulation de code phits*

## I. Description de la géométrie :

Dans notre travail, nous allons simuler l'effet du rayonnement ionisant sur une solution d'ADN plasmidique par les électrons. La géométrie simulée est une sphère d'un rayon de 5 centimètres. En a fait l'irradiation des solutions différentes. Le rayonnement est généré à partir d'une source d'électrons dont l'emplacement est au bord de la sphère.

### I.1. Description de la source :

Une source d'électron caractérisée par une énergie variable,  $E = 0.01, 0.05, 0.1, 0.5, 1, 5, 10, 50, 100\text{MeV}$ , Placée au bord du sphère de la solution.

### I.2. Description des matériaux :

On a quatre solutions différentes, la 1<sup>er</sup> solution seulement l'eau avec une densité :  $\rho = 1\text{ g/cm}^3$  la 2<sup>eme</sup> est un mélange de 10% d'ADN plasmidique PUC19 : 2686 pb, avec une densité  $\rho = 1,407\text{ g/cm}^3$  et 90 % d'eau ( $\rho = 1\text{ g/cm}^3$ ), la 3<sup>eme</sup> est composée de 20% arginine son abréviation est Arg et son structure est :  $\text{C}_6\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_2$ , la masse molaire est  $174.2\text{ g/mol}$ , avec une densité :  $\rho = 1.1\text{ g/cm}^3$  (L'arginine est un acide aminé classé parmi les acides aminés semi-essentiels riches en azote, que l'organisme ne peut pas synthétiser), et 30% d'ADN plasmidique et 50 % d'eau. la 4<sup>eme</sup> solution est contenant de 20% nanoparticule d'Or (Au), avec une densité  $\rho = 19.3\text{ g/cm}^3$ , et 30% d'ADN plasmidique et 50 % d'eau.

Les tableaux suivants représentent le pourcentage atomique de PUC19 et Arg :

Elément	Pourcentage atomique
<b>C</b>	0.233
<b>H</b>	0.437
<b>N</b>	0.090
<b>O</b>	0.215
<b>P</b>	0.024

**Tableau III.1:** Pourcentages atomique des composants d'ADN.

Elément	Pourcentage atomique
<b>C</b>	<b>0.413</b>
<b>H</b>	<b>0.080</b>
<b>N</b>	<b>0.321</b>
<b>O</b>	<b>0.184</b>

**Tableau III.2 :** Pourcentages atomique d'Arg.

II. résultats et interprétation :

Partie I :

- Pour solution d'eau :

La figure suivante représente le trajet les électrons et des photons obtenir par le code PHITS :

- Pour 0.1 MeV :

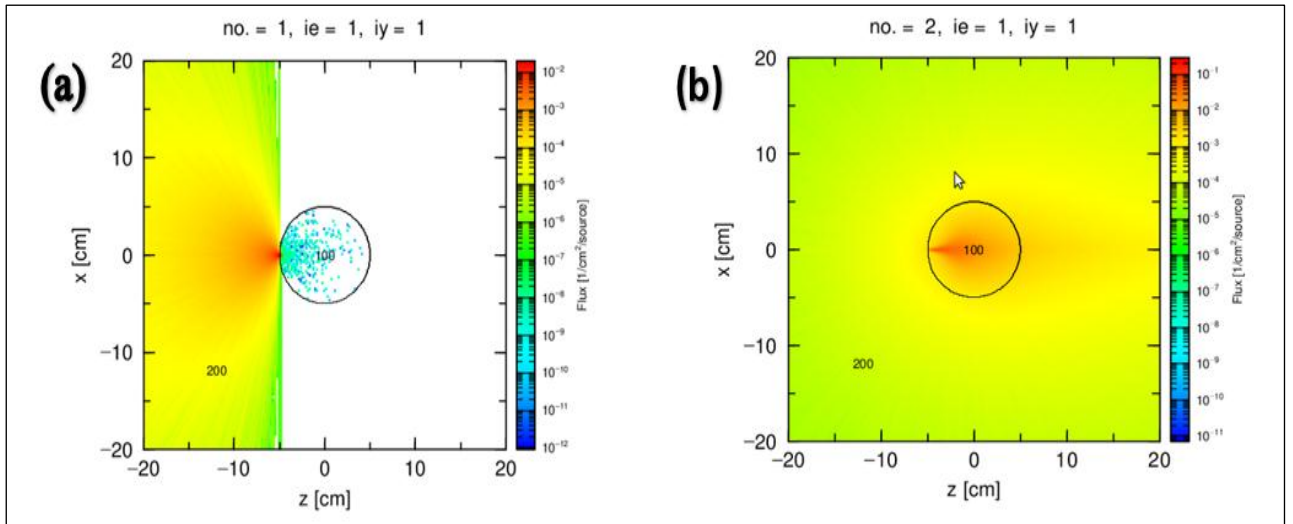


Figure III.1 : le trajet des électrons(a) et photons (b) obtenu par [T-Track] section.

- Pour 10 MeV :

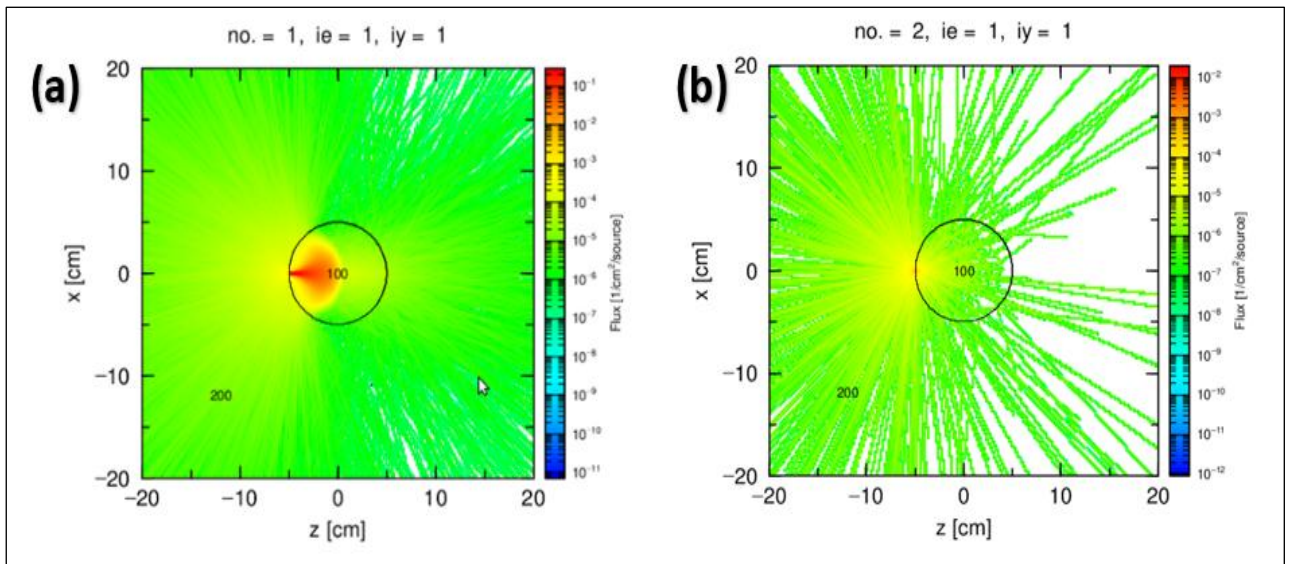
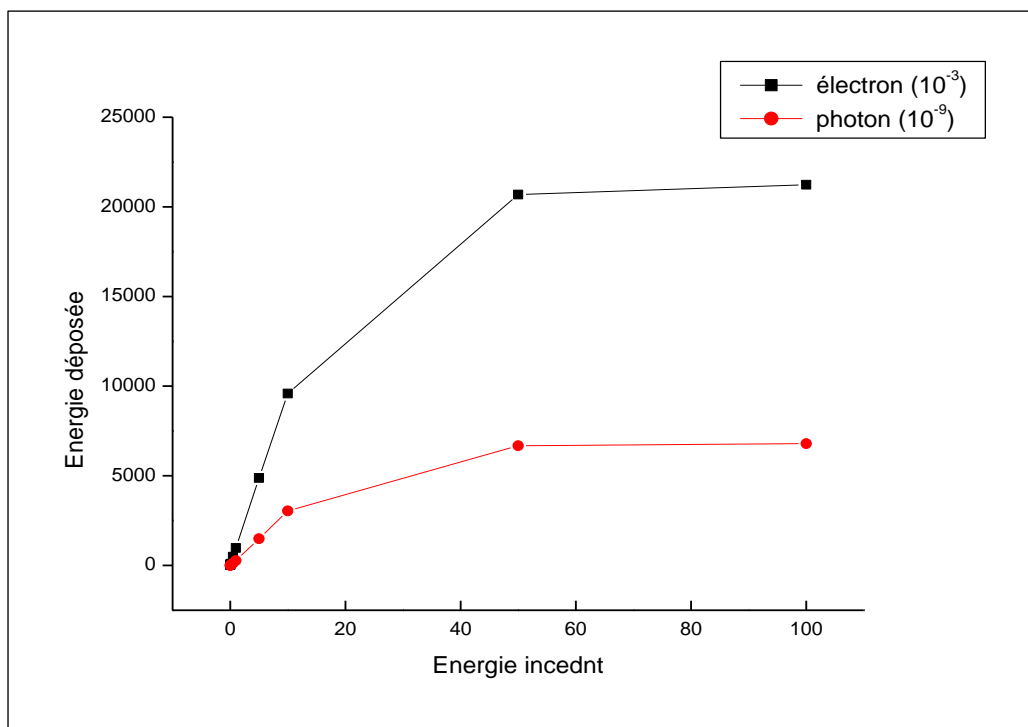


Figure III.2 : le trajet des électrons (a) et photons (b) obtenu par [T-Track] section.

Le tableau suivant représente l'énergie déposée par les électrons et les photons secondaires obtenir :

Energie incident (MeV)	Energie déposée (MeV/cm <sup>3</sup> /source)	
	Électron (*10 <sup>-3</sup> )	Photon (*10 <sup>-9</sup> )
0.01	9.5971	0.01
0.05	48.170	0.05
0.1	96.529	0.1
0.5	485.55	0.5
1	976.14	1
5	4881.0	5
10	9590.5	10
50	20686	50
100	21232	100

**Tableau III.3** : la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.



**Figure III.3:** courbe la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.

- Pour la solution H<sub>2</sub>O+ ADN :

La figure suivante représente le trajet les électrons et des photons obtenir par le code PHITS :

- Pour 0.1 MeV :

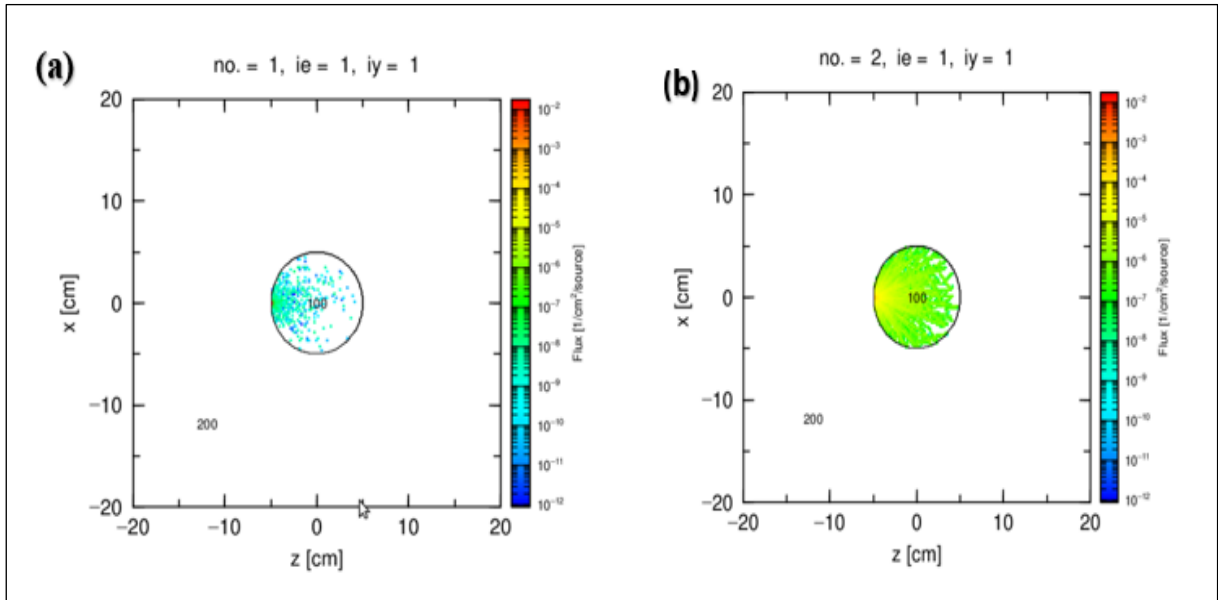


Figure III.4 : le trajet des électron (a) et photons (b) obtenu par [T-Track] section.

- Pour 10 MeV :

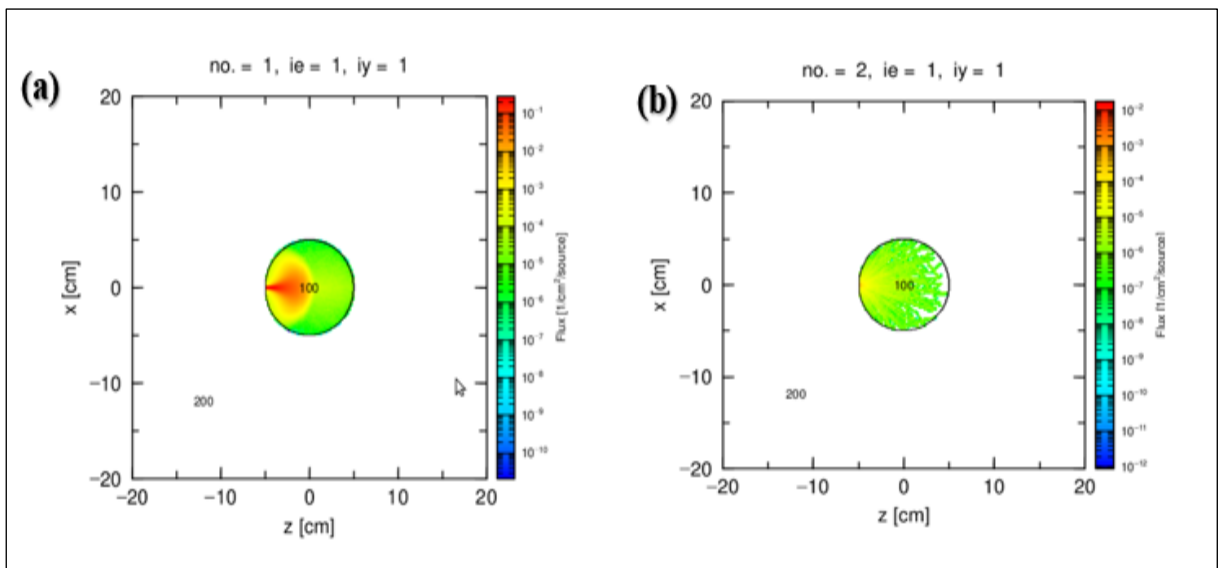
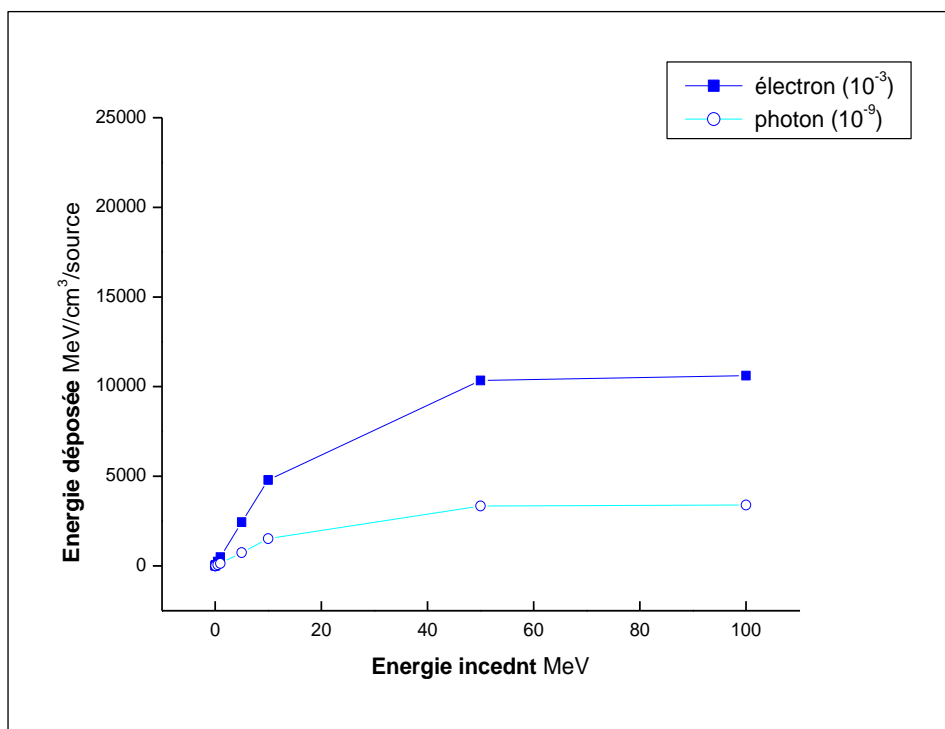


Figure III.5 : le trajet des électrons (a) et photons (b) obtenu par [T-Track] section.

Le tableau suivant représente la dose déposée par les électrons et les photons secondaire obtenir par le code PHITS :

Energie incident (MeV)	Energie déposée (MeV/cm <sup>3</sup> /source)	
	Électron (*10 <sup>-3</sup> )	Photon (*10 <sup>-9</sup> )
0.01	4.7985	0.5250
0.05	24.085	3.9375
0.1	48.265	9.7125
0.5	242.77	60.637
1	488.07	136.50
5	2440.5	743.40
10	4795.3	1522.8
50	10343	3340.3
100	10616	3395.4

**Tableau III.4 :** la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.



**Figure III.6 :** courbe la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.

- Pour l'eau et ADN et Arg :
  - Pour 0.1 MeV :

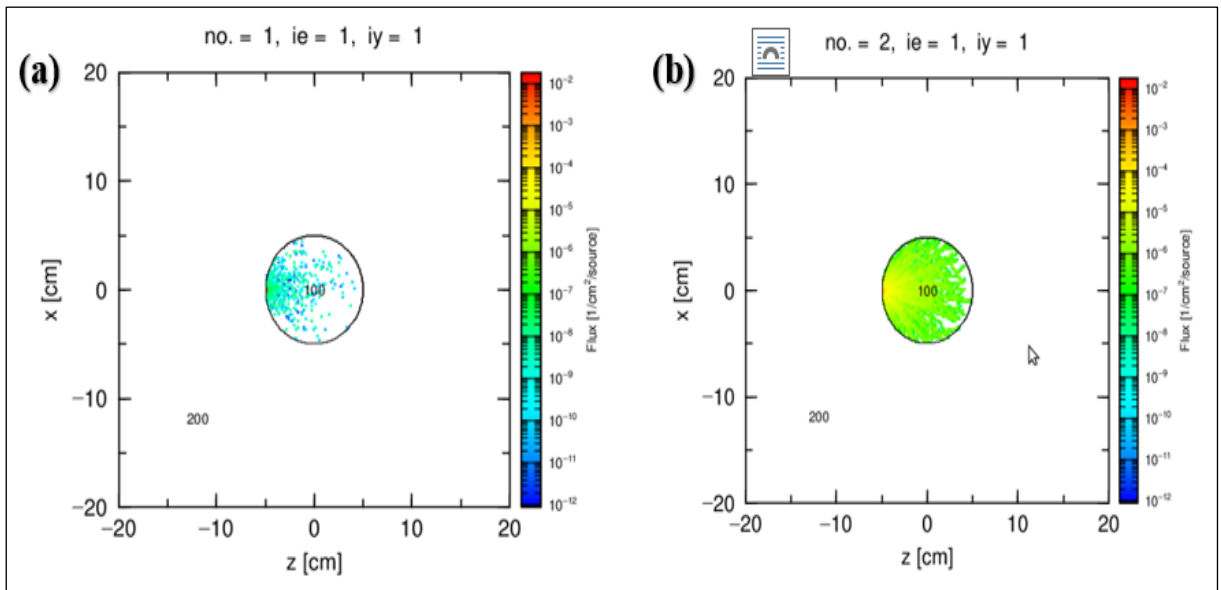


Figure III.7 : le trajet des électrons (a) et photons (b) obtenu par [T-Track] section.

- Pour 10 MeV :

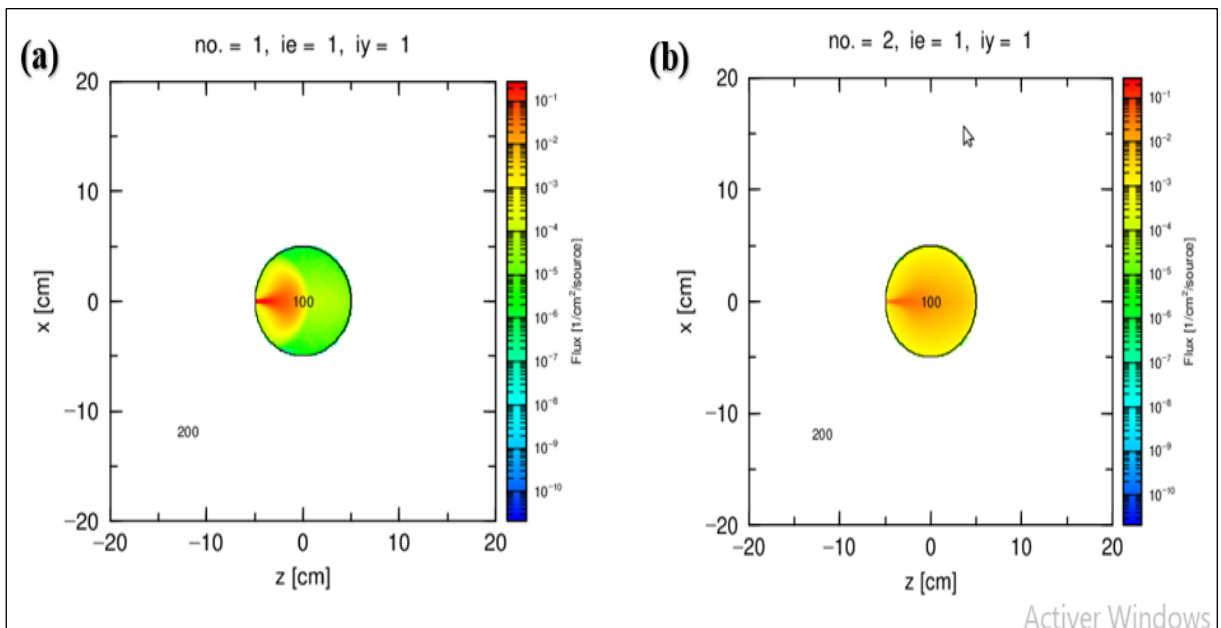


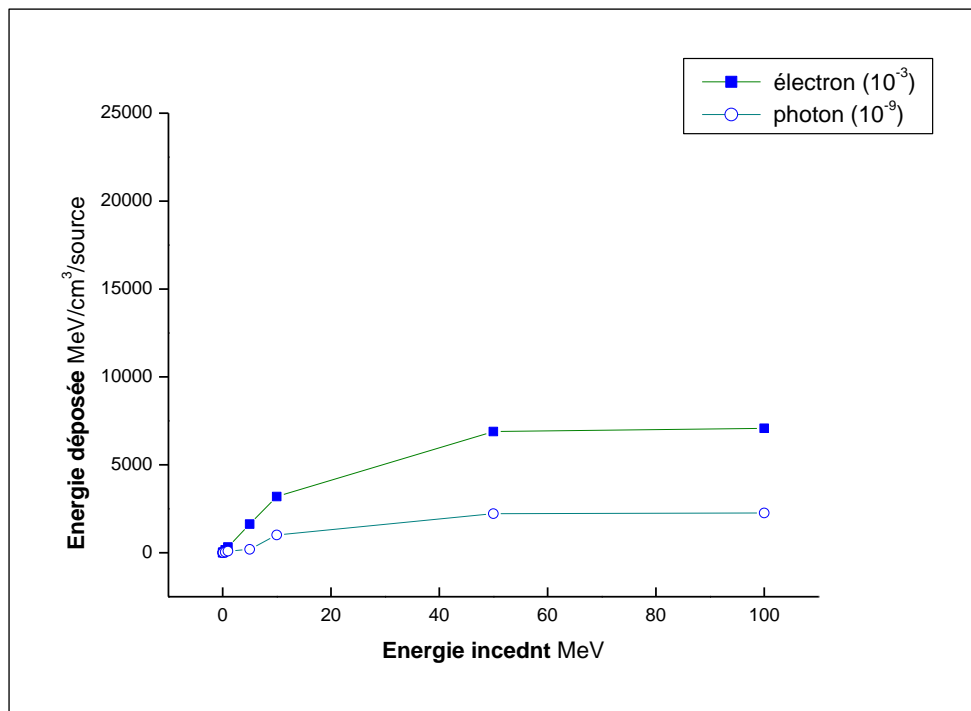
Figure III.8 : le trajet des électrons (a) et photons (b) obtenu par [T-Track] section.



Le tableau suivant représente la dose déposée par les électrons et les photons secondaire obtenir par le code PHITS :

Energie incident (MeV)	Energie déposée (MeV/cm <sup>3</sup> /source)	
	Électron (*10 <sup>-3</sup> )	Photon (*10 <sup>-9</sup> )
0.01	3.1990	0.3500
0.05	16.057	2.6250
0.1	32.176	6.4750
0.5	161.85	40.425
1	325.38	91.000
5	1627.0	195.60
10	3196.8	1015.2
50	6895.4	2226.9
100	7077.3	2263.6

**Tableau III.5:** la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.



**Figure III.9 :** courbe la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.

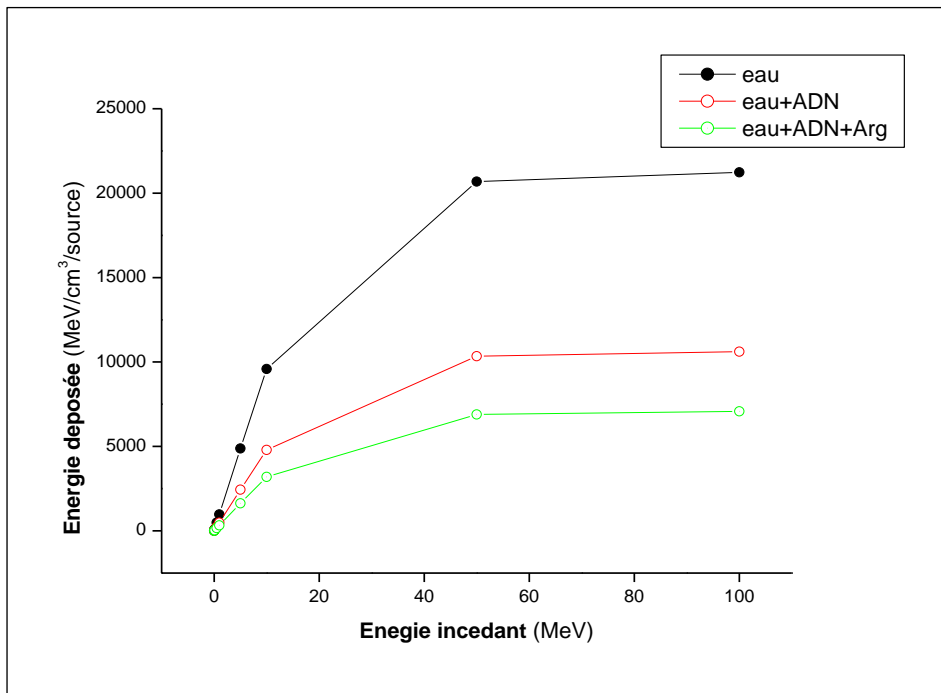


Figure III.10 : courbe la variation d'énergie transféré des électrons en fonction d'énergie incidente.

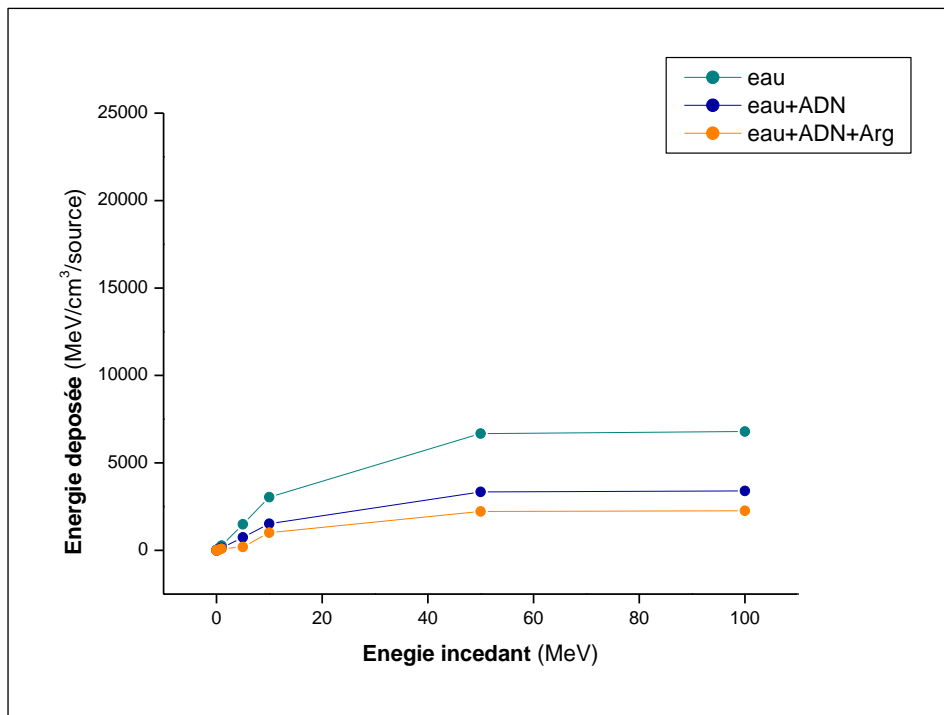


Figure III.11: courbe la variation d'énergie transféré des photons en fonction d'énergie incidente.

On remarque globalement la même forme de variation d'énergie déposée par les électrons et les photons secondaires en fonction d'énergie déposée par les électrons incident pour les trois solutions (eau, eau ADN, eau+ADN+Arg). Pour l'énergie incident 50 MeV on observe une valeur maximale d'énergie déposée par les électrons et les photons secondaires pour les trois solutions irradiées, Pour le cas d'eau(control)  $D=1 \text{ g/cm}^3$ , on observe que l'énergie déposée pour la densité plus petite prend une valeur maximale d'énergie déposée par les électrons et les photons secondaires para port autre solutions (eau+ADN, eau+ADN, eau+ADN+Arg). Par contre quand on change la matière avec une densité plus grand(eau+ADN+Arg) on note augmenter d'énergie déposée par les électrons et les photons secondaires en fonction d'énergie incident. (D'après la théorique l'énergie déposée inversement proportionnelle à la densité du milieu donc ce cas à chaque fois la densité minimale comme le cas d'eau l'énergie déposée augmentée).

- Pour la solution :  $\text{H}_2\text{O} + \text{ADN} + \text{Au}$  :

L'irradiation se fait par les électrons de 10 KeV à 1MeV :

Energie incident (MeV)	Energie déposée (MeV/cm <sup>3</sup> /source)	
	Électron (*10 <sup>-3</sup> )	Photon (*10 <sup>-9</sup> )
0.01	3.2180	0.8750
0.05	16.158	2.8000
0.1	32.351	7.8750
0.5	162.69	44.625
1	326.96	99.750

Tableau III.6: la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.

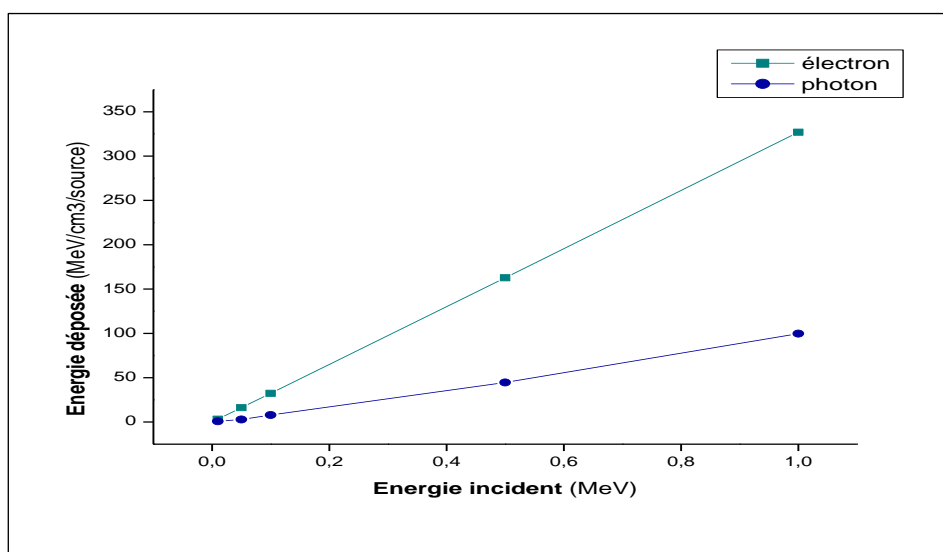


Figure III.12: courbe la variation d'énergie transféré des électrons et photons en fonction d'énergie incidente.

Nous remarquons dans ce cas que l'énergie déposée aux électrons et photons le milieu irradié atteindre des valeurs maximums par rapport aux autre solution a cause de la densité elvée de cette solution. Donc les nanoparticules d'or ayant une grande absorption des radiations se qui conduit a la réduction des dommages d'ADN.

**Partie II :**

Dans cette partie nous avons changé la position de la source d'électron et son énergie, la source est localisée d dans la sphère de solution et l'énergie prend les valeurs E= (0.01, 0.05, 0.1, 0.5, 1) MeV.

Les tableaux suivants représentent l'énergie déposée aux les électrons et les photons secondaire obtenir :

**Pour la solution d'eau :**

Energie incident (MeV)	Energie déposée (MeV/cm <sup>3</sup> /source)	
	Électron (*10 <sup>-3</sup> )	Photon (*10 <sup>-9</sup> )
0.01	9.6975	1.0500
0.05	49.768	9.4500
0.1	99.555	22.050
0.5	497.41	130.72
1	993.60	292.95

**Tableau III.7:** la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.

- **Pour la solution H<sub>2</sub>O + ADN :**

Energie incident (MeV)	Energie déposée (MeV/cm <sup>3</sup> /source)	
	Électron (*10 <sup>-3</sup> )	Photon (*10 <sup>-9</sup> )
	Électron (*10 <sup>-3</sup> )	Photon (*10 <sup>-9</sup> )
0.01	4.9838	0.5250
0.05	24.884	4.7250
0.1	49.777	11.025
0.5	248.71	65.362
1	496.80	146.47

**Tableau III.8 :** la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.

Pour la solution H<sub>2</sub>O+ ADN +Arg :

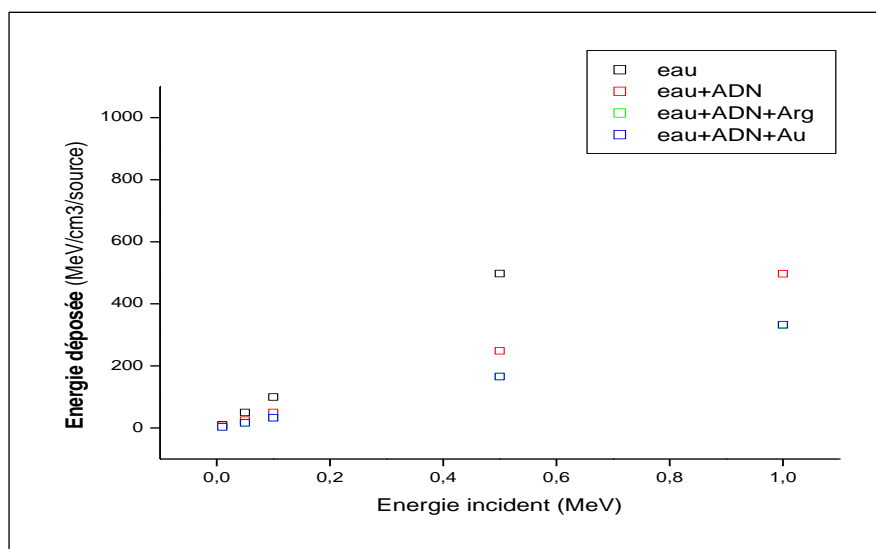
Energie incident (MeV)	Energie déposée (MeV/cm <sup>3</sup> /source)	
	Électron (*10 <sup>-3</sup> )	Photon (*10 <sup>-9</sup> )
	Électron (*10 <sup>-3</sup> )	Photon (*10 <sup>-9</sup> )
0.01	3.3225	0.3500
0.05	16.589	3.1500
0.1	33.185	7.3500
0.5	165.80	43.575
1	331.12	97.650

**Tableau III.9:** la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.

Pour la solution d'eau et ADN et Au :

Energie incident (MeV)	Energie déposée (MeV/cm <sup>3</sup> /source)	
	Électron (*10 <sup>-3</sup> )	Photon (*10 <sup>-9</sup> )
	Électron (*10 <sup>-3</sup> )	Photon (*10 <sup>-9</sup> )
0.01	3.3132	0.8750
0.05	16.565	3.6750
0.1	33.139	8.7500
0.5	165.60	50.750
1	332.65	98.780

**Tableau III.10:** la variation d'énergie transféré aux électrons et photons en fonction d'énergie incidente.



**Figure III.13:** courbe la variation d'énergie transféré des électrons en fonction d'énergie incidente.

Le tableau suivant représente la dose déposée par les électrons et les photons secondaire obtenir par le code PHITS :

Energie Incident (MeV)	Energie déposée (MeV/cm <sup>3</sup> /source)							
	eau		eau+ADN		eau+ADN+Arg		Eau+ADN+Au	
	Électron (*10 <sup>-3</sup> ) au bord de sphère	Electron (*10 <sup>-3</sup> ) dans la sphère	Électron (*10 <sup>-3</sup> ) au bord de sphère	Electron (*10 <sup>-3</sup> ) dans la sphère	Électron (*10 <sup>-3</sup> ) au bord de sphère	Electron (*10 <sup>-3</sup> ) dans la sphère	Électron (*10 <sup>-3</sup> ) au bord de sphère	Electron (*10 <sup>-3</sup> ) dans la sphère
0.01	9.5971	9.6975	4.7985	4.9838	3.1990	3.3225	3.2180	3.3132
0.05	48.170	49.768	24.085	24.884	16.057	16.589	16.158	16.565
0.1	96.529	99.555	48.265	49.777	32.176	33.185	32.351	33.139
0.5	485.55	497.41	242.77	248.71	161.85	165.80	162.69	165.60
1	976.14	993.60	488.07	496.80	325.38	331.20	326.96	330.80

Tableau III.11: la variation d'énergie transféré aux électrons en fonction d'énergie incidente.

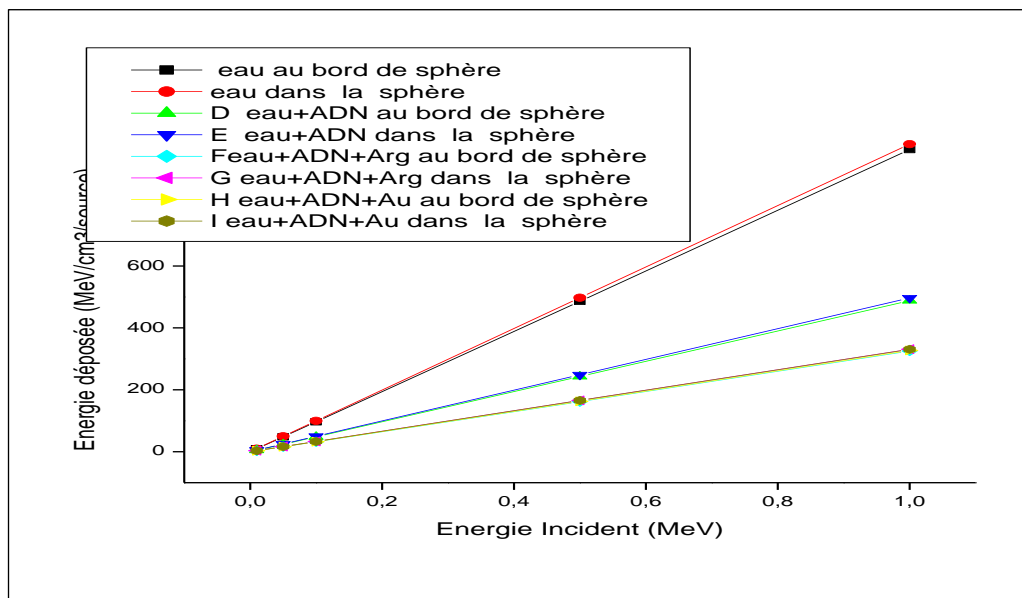


Figure III.14: courbe la variation d'énergie transféré des électrons en fonction d'énergie incidente.

Dans cette partie nous nous intéressons au trajet des électrons et l'énergie déposée avec les énergies suivantes :  $E = 0.01, 0.05, 0.1, 0.5, 1$  MeV.

Nous avons changé la position de la source d'électron (la source dans la sphère). On remarque l'énergie déposée aux électrons dans toutes les solutions augmente, par rapport à celle obtenue au cas où la source est localisée au bord de la sphère. Surtout notre résultat bien montre dans le cas d'Arg et d'Or.

Comme conclusion, alors, plus la source est proche de l'échantillon, l'énergie déposée augmente, et donc les dommages d'ADN augmentent.

# *Conclusion*



## *Conclusion*

Plusieurs simulations Monte-Carlo existent, et nous avons choisi le code PHITS comme outil de simulation pour modéliser le transport des particules chargées dans la matière. En effet, le but de ce travail était une simulation de Monte Carlo capable des effets des rayonnements ionisants directs et indirects sur le vivant (ADN) et des matériaux non vivants (Arginine, Or) par les électrons émis par source.

L'utilisation du code de simulation Monte-Carlo PHITS version 3,16. Où nous avons suivi l'évolution de l'énergie déposée par des électrons et photons secondaires résultant des électrons incidents avec des énergies variables, pour des milieux aqueuses (eau, eau+ADN, eau+ADN+Arg et eau+ADN+Au), le travail était basé sur la compréhension des aspects physiques de l'interaction du rayonnement avec la matière ainsi que les fonctions et la structure du code PHITS 3.16. Nous avons choisi de suivre l'évolution du dépôt d'énergie en tant que fonction énergétique élémentaire afin de trouver la matière capable absorber le rayonnement ionisant pour protéger la matière vivante (ADN).

Dans ce travail cet calcule l'énergie dans une solution aqueuse contenu d'ADN et des autres matériaux (l'eau, acide aminé d'Arginine, nanoparticules d'Or) dans le but est de voir quelle est la solution qui a grande absorption d'énergie. Ce qui signifie la protéger d'ADN contre les effets directe ou indirecte des rayonnements.

Notre résultat qui indiquer que l'augmentation dans la densité entraine une diminution de l'énergie déposée à les électrons et photons, ceci que nous avons vu dans le cas de l'acide aminé d'Arginine et d'Or.

L'utilisation de particule nanométrique d'Or et Arginine dans solutions contenue d'ADN réduire l'augmentation de la dose absorbe par ces deux matériaux mais ce qui conduit à minimiser les dommages d'ADN d'après les conclusions des chercheurs.

Les résultats obtenus dans tous les cas sont eus bon accord avec la théorie.

# *Bibliographie*

## **Bibliographie**

- [1] : MERABTINE, W. (2020). Calcul semi-empirique du Rapport d'intensité d'émission de rayons X par des photons (Faculté des Sciences et Technologies).
- [2] : Jimonet, C., & Métivier, H. (2007). Collectif : Principes de radioprotection : Réglementation. EDP SCIENCES.
- [3] Radiation oncology physics: a handbook for teachers and students", ISBN 92-0-107304-6 (Vienna, 2005).
- [4] Jonathan Fulford, (2000). QUANTIFICATION OF COMPLEX DNA DAMAGE BY IONISING RADIATION: AN EXPERIMENTAL AND THEORETICAL APPROACH.
- [5]: Bailey, D. L., & Humm, J. L. (2014). Nuclear medicine physics: a handbook for teachers and students. Iaea.
- [6] : Souici, M., & Belafrites, A. R. (2016). Etude des dommages radio-induits par les protons et les rayons X ultra-mous dans l'ADN à l'état solide et en phase aqueuse (Doctoral dissertation).
- [7] : Rossignol, J. (2019). Tomodensitométrie à temps de vol de photons.
- [8] : Khan, F. M., & Gibbons, J. P. (2014). Khan's the physics of radiation therapy. Lippincott Williams & Wilkins.
- [9] : Dance, D. R., Christofides, S., Maidment, A. D. A., McLean, I. D., & Ng, K. H. (2014). Diagnostic radiology physics. International Atomic Energy Agency.
- [10] : Podgorsak, E. B. (2005). Radiation oncology physics. Vienna: International Atomic Energy Agency, 123-271.
- [11]: Nicol, S. (2010). Étude et construction d'un tomographe TEP/TDM pour petits animaux, combinant modules phoswich à scintillateurs et détecteur à pixels hybrides (Doctoral dissertation).
- [12] : Pouthier, T. (2006). Mise en évidence de cassures double brin de l'ADN induites par irradiation de kératinocytes humains en microfaisceau alpha (Doctoral dissertation, Université Sciences et Technologies-Bordeaux I).

- [13] : MERABTINE W , (2020), Calcul semi-empirique du Rapport d'intensité d'émission de rayons X ( $K\beta$   $K\alpha$  ) par des photons,
- [14] : Bourouis Nahla \_ Boucenna Sakina (2020) Evaluation dosimétrique de la stéréotaxie cérébrale avec un LINAC (accélérateur) par simulation Monte-Carlo
- [15] : IAEA, I. (2010). Radiation biology: a handbook for teachers and students. Vienna, Austria : IAEA.
- [16] : Fulford, J. (2000). Quantification of complex DNA damage by ionising radiation: an experimental and theoretical approach (Doctoral dissertation).
- [17]: DAHI el hadj et MEHERCHI Lamia, 2011 Système de double calcul dosimétrique.
- [18] : : Décembre, 2012, Introduction au rayonnement.
- [19] : : Pham, Q. T. (2014). Couplage et validation de l'extension GeantA-DNA dans la plateforme de simulation Monte Carlo GATE pour l'irradiation de molécules d'ADN dans un environnement de grille de calcul (Doctoral dissertation, Université Blaise Pascal-Clermont-Ferrand II).
- [20] : Messaoudi, R, Senouci ,M. (2020). Etude simulatrice de l'irradiation d'une solution aqueuse par code PHITS de simulation Monte Carlo ( University of Jijel).
- [21] : Breton, M. (2009). Les plasmides pSci de *Spiroplasma citri* GII3: caractérisation fonctionnelle et rôle dans la transmission par l'insecte vecteur (Doctoral dissertation, Bordeaux 2).
- [22] : Ancel, L. (2013). Reconnaissance de l'ADN par des complexes peptidiques des lanthanides (Doctoral dissertation, Grenoble).
- [23] : Fulford, J. (2000). Quantification of complex DNA damage by ionising radiation: an experimental and theoretical approach (Doctoral dissertation).
- [24]: D.Sakata et al, physique médica 62(2019),152-157.
- [25] : : Cécile Dubois, 2017, Approche intégrée des dommages des rayonnements ionisants chez *Caenorhabditis elegans* : de l'ADN aux protéines.
- [26] : Thomas Pouthier, 2009, Mise en évidence de cassures double brin de l'ADN induites par irradiation de kératinocytes humains en microfaisceau alpha.

- [27] : Sébastien INCERTI, 2013, Modélisation de la topologie des dépôts d'énergie créés par un rayonnement ionisant à l'échelle nanométrique dans les noyaux cellulaires et relation avec les événements précoces radio-induits.
- [28] : : Gillard, N. (2005). Effets des radiations ionisantes sur des complexes ADN-protéine (Doctoral dissertation, Université d'Orléans).
- [29] : Fromm, M., & Boulanouar, O. (2016). Low energy electrons and ultra-soft X-rays irradiation of plasmid DNA. Technical innovations. Radiation Physics and Chemistry
- [30] : : Wong, J. W. (2003). The Construction of pBR322 $\Delta$ rop and Its Interaction with pUC19 with Respect to Plasmid Copy Number and the Exclusion Effect. J. Exp. Microbiol. Immunol.
- [31] : Stephenson, F. H. (2016). Calculations for molecular biology and biotechnology. Academic press.
- [32] : BENMICHIA, R. FEDALA F. (2016) , LA METHODE MONTE CARLO ET SES APPLICATIONS, Universitaire de Mila- Algérie.
- [33] : Bouaroudj, L., Touier, R., & Benmiçia, N. E. (2021). Effet dosimétrique des radiations électrons sur l'ADN plasmidique secs basés sur la simulation Monté Carlo ( Université de jijel).
- [34] : : Mazurier, J. (1999). Adaptation du code de Monte Carlo PENELOPE pour la métrologie de la dose absorbée: caractérisation des faisceaux de photons X de haute énergie et calcul de facteurs de correction de dosimètres de référence (Doctoral dissertation, Toulouse 3).
- [35] : Dziri, S. (2013). Etudes expérimentales et simulations Monte Carlo en spectrométrie  $\gamma$ : Correction des effets de cascade et de matrice pour des mesures environnementales (Doctoral dissertation, Université de Strasbourg).
- [36] : ] Zaidi, H., & Sgouros, G. (2002). Therapeutic applications of Monte Carlo calculations in nuclear medicine. CRC Press.
- [37] : Badel, J. N. (2009). Simulation par methodes Monte Carlo de la dosimétrie par imagerie portale numerique dans le cadre du controle du traitement en radiotherapie.
- [38] : Berger, M. J. (1963). Monte Carlo calculation of the penetration and diffusion of fast charged particles. Methods in Computational Physics.

- [39] : Thiam, C. O. (2003). Simulation Monte Carlo de l'accélérateur linéaire clinique SL-ELEKTA. Etude dosimétrique dans un fantôme d'eau (Doctoral dissertation, 54).
- [40] : Abdelkader Loussaief, (2007), Modélisation des sources gamma étendues par la méthode des moments : Application aux irradiateurs au  $^{60}\text{Co}$ . UNIVERSITE TUNIS-EL MANAR FACULTE DES SCIENCES DE TUNIS.
- [41] : Pham, Q. T. (2014). Couplage et validation de l'extension GeantA-DNA dans la plateforme de simulation Monte Carlo GATE pour l'irradiation de molécules d'ADN dans un environnement de grille de calcul (Doctoral dissertation, Université Blaise Pascal-Clermont-Ferrand II).
- [42] : Francis, Z. (2007). Simulations Monte-Carlo et étude microdosimétrique pour des irradiations cellulaires à faibles doses en neutrons de 14 MeV (Doctoral dissertation, Université Blaise Pascal-Clermont-Ferrand II).
- [43] : Saadia-Benhalouche, 2014, les codes de Simulation Monte Carlo
- [44] : Thunyarat Chusin, 2020, Validation of mammographic x-ray spectra generated using
- [45] : T. Sato et al., 2017, 2018, PHITS Ver 3.17.
- [46] : Koji NIITA et al., (2011), Recent Developments of the PHITS code.
- [47] : Koji NIITA, et al., 2010, PHITS: Particle and Heavy Ion Transport code System, Version 2.23.
- [48] : Sato, T., Niita, K., Matsuda, N., Hashimoto, S., Iwamoto, Y., Noda, S., ... & Sihver, L. (2014). Overview of the PHITS code and its application to medical physics. *Prog Nucl Sci Technol*, 4, 879-882.
- [49] : Niita, K., Matsuda, N., Iwamoto, Y., Sakamoto, Y., Nakashima, H., Sato, T., ... & Mancusi, D. (2007, March). PHITS overview. In *AIP Conference Proceedings* (Vol. 896, No. 1, pp. 61-70). American Institute of Physics

## Résumé

Dans ce mémoire, à l'aide de l'un des outils de la simulation Monte Carlo, nous réalisons l'irradiation des milieux aqueuses (eau, eau+ADN, eau+ADN+Arg et eau+ADN+Au) par une source des électrons avec des énergies variables nous calculons les énergies déposées aux électrons et photons générés par cette source au bord et dans les milieux irradiés. Les résultats obtenus sont en bon accord avec la théorie c.-à-d. quand la densité de milieu augmente l'énergie déposée diminue comme dans le cas d'Or et d'Arginine. Cette étude est réalisée à l'aide du code PHITS.

**Mots clé :** PHITS, ADN plasmidique, les électrons secondaires.

## Abstract

This master's thesis work represents a simulative study of the Monte Carlo simulation tools, we irradiate aqueous media (water, water + DNA, water + DNA + Arg and water + DNA + Au) with an electron source of varying energies and calculate the deposited energies of the electrons and photons generated by this source at the edge and in the irradiated media. The results obtained are in good agreement with the theory, that's to say. as the density of the medium increases, the deposited energy decreases as in the case of Gold and Arginine this work is done using PHITS Monte Carlo simulation code.

**Keywords:** PHITS, secondary electrons, DNA plasmid

## ملخص

في مذكرتنا هذه قمنا باستخدام احدى أدوات مونتني كارلو للمحاكاة من اجل تشيع محاليل مائية مختلفة (الماء، الماء+الحمض النووي، الماء+الحمض النووي+ الحمض الاميني الارجيني، الماء+الحمض النووي+ جسيمات صغيرة جدا من الذهب) بواسطة مصدر من الالكترونات ذات طاقات متغيرة، حيث تابعنا تطور الطاقة المترسبة من طرف الالكترونات الثانوية والفوتونات المنبعثة بدلالة طاقة الالكترونات الابتدائية وسجلنا الصورة التي تم توليدها من طرف المصدر في حالة وجوده عند الحافة وفي حالة كونه داخل المحلول. لاحظنا في النهاية ان النتائج التي حصلنا عليها تتوافق مع النظرية من حيث المبدأ، أي ان الزيادة في الكثافة تخفض من الطاقة المودعة كما هو الحال في المحلول الذي يحتوي على الحمض الاميني الارجيني والمحلول الذي يحتوي على جسيمات صغيرة جدا من الذهب. تمت هذه الدراسة باستخدام كود فيتس.

**الكلمات المفتاحية:** بلازميد الحمض النووي، الالكترونات الثانوية، فيتس.