

# Intégration des sections efficaces moléculaires dans l'outil de simulation Geant4-DNA

DIRECTEUR DE THESE : ZIAD EL BITAR (CR1)

TEL : 03 88 10 63 81 ; E-MAIL : [ZIAD.ELBITAR@IPHC.CNRS.FR](mailto:ZIAD.ELBITAR@IPHC.CNRS.FR)

CO-DIRECTEUR DE THESE : REMI BARILLON (PR1)

TEL : 03 88 10 64 09 ; E-MAIL : [REMI.BARILLON@IPHC.CNRS.FR](mailto:REMI.BARILLON@IPHC.CNRS.FR)

INSTITUT PLURIDISCIPLINAIRE HUBERT CURIEN, 23 RUE DU LOESS, BP28, 67037 STRASBOURG

Le logiciel Geant4-DNA est une librairie de classe C++ qui est largement utilisée pour la modélisation des interactions des particules avec la matière en se basant sur la méthode Monte Carlo.

A la base de ce logiciel, il existe des tables de sections efficaces d'interactions (totales et différentielles) qui représentent la probabilité d'occurrence des interactions, de type de particules secondaires produites, des énergies et des directions de celles-ci.

Ces sections efficaces peuvent être calculées théoriquement ou obtenues expérimentalement. La majorité des sections efficaces mesurées de nos jours sont obtenues à partir de cibles monoatomiques et non pas moléculaires. Pour des applications de dosimétrie et de radiobiologie, il est essentiel d'avoir des sections efficaces moléculaires.

Le groupe de Radiochimie de l'IPHC possède une base donnée importante de sections efficaces moléculaires pour des polymères et des molécules d'intérêt biologique, à ce jour non exploitée dans les logiciels de calcul à base de méthodes de Monte Carlo. Des données sur le rendement chimique des espèces secondaires créées lors d'interactions particules-molécule sont aussi disponibles.

En collaboration avec le groupe DeSIs (Dosimétrie, Simulation et Instrumentation), le but de la thèse est d'intégrer la base de données des sections efficaces moléculaires dans le logiciel de simulation Geant4-DNA. Ce travail est d'une importance majeure puisqu'il permettra de délivrer à la communauté des physiciens et des chimistes travaillant dans le domaine de la dosimétrie et de la microdosimétrie un outil de calcul puissant qui permet de modéliser très précisément les interactions des particules avec une large gamme de molécules.

La validation des simulations faites au cours de la thèse sera faite grâce à un travail de comparaison avec des données publiées dans l'état de l'art ainsi que des mesures expérimentales obtenues dans le cadre de l'International Open Laboratory avec le National Institute of Radiological Sciences de Chiba au Japon.