

## DOMMAGES CAUSÉS À LA MOLECULE D'ADN PAR LES EFFETS CONJUGUÉS DE DEUX DISTRIBUTIONS D'ESPÈCES RADIOLYTIQUES

Reçu le 11/05/2007 – Accepté le 04/05/2009

### Résumé

L'ADN, support de l'information génétique de la cellule, est la cible la plus importante lors d'une exposition à un rayonnement ionisant (radiothérapie, scintigraphie...). Sa dégradation est à l'origine de désordres cellulaires dramatiques comme la cancérisation. Pour quantifier ces effets, nous avons considéré deux électrons d'énergie incidente 1 KeV qui traversent un milieu aqueux fournissant chacun une distribution de radicaux libres ( $e_{aq}^-$ , H, OH,  $H_{aq}^+$ ,  $H_2$ ,  $H_2O_2$ ,  $OH^-$ ,  $O_2$ ,  $O_2^-$ ,  $HO_2$ ,  $HO_2^-$ ) que nous avons fait évoluer selon un ensemble de codes informatiques élaborés sur un modèle déterministe jusqu'à leur collision et estimer ainsi la concentration et le rendement de chaque espèce. Dans cette étude, nous n'avons considéré que les espèces les plus agressives vis à vis des molécules biologiques  $e_{aq}^-$ , H et plus particulièrement l'hydroxyle OH. Nous avons ainsi estimé le nombre moyens de diverses lésions portées à l'ADN. L'intérêt essentiel de cette étude est la mise au point d'un modèle simple d'adaptation facile du point de vue applications qui peut renseigner sur les dommages causés à une molécule aussi importante que l'ADN.

**Mots clés:** Radiothérapie, Monte-Carlo, diffusions, distribution spatio-temporelle, espèces radiolytiques, rendement radiochimique.

### Abstract

DNA which bears the genetic information of the cell is the critical target for radiolytic attack during a radiation exposure (radiotherapy, scintigraphy...). Its damage lead to cell disorders which originally of appearance of cancer. To quantify these effects, we have considered two energetic electrons of 1 KeV which cross the liquid water and each one create a distribution of radiolytics species ( $e_{aq}^-$ , H, OH,  $H_{aq}^+$ ,  $H_2$ ,  $H_2O_2$ ,  $OH^-$ ,  $O_2$ ,  $O_2^-$ ,  $HO_2$ ,  $HO_2^-$ ). We have elaborated a deterministic time function model and computers codes, where the motion and the chemical reactions between the two distributions are simulated until their collision. The main obtained results are the spatial and temporal distributions as well as the yield (the G-values) of the radicals products coming from the water radiolysis. In this work, we have considered the three highly reactive species  $e_{aq}^-$ , H and particularly the most reactive one: the oxidative hydroxyl radical OH which strike a blow at essential macromolecules and we have estimated the mean number of DNA lesions.

The main interest of these models settled up is their great easiness of adaptation on the application side and the results obtained on damage to DNA.

**Keywords:** Radiotherapy, Monte-Carlo, scattering, spatio-temporal distribution, radiolytic species, G-value.

M.E.K. ABDELMOUMENE\*  
A. SAIFI\*\*

\* Département de Pharmacie  
Faculté des Sciences Médicales  
Chalet des pins. Bon Pasteur B.P.  
125. Constantine. Algérie.  
\*\* Département d'électronique  
Faculté des Sciences Université  
Mentouri. Constantine. Algérie.

### ملخص

ADN ، حامل المعلومات الوراثية للخلاية، فهي الهدف الأكثر تعرضا للإشعاع المؤين (المعالجة بالأشعة، الفحص بالأشعة...). تدهورها هو السبب في ظهور تبعثر خلوي كالخلايا السرطانية.

لتجنب هذه الحوادث اعتبرنا إلكترونين ذوي طاقة واردة 1 KeV اللذان يعبران وسط مائيا محررا كلا منهما توزيعا جذريا ( $e_{aq}^-$ , H, OH,  $H_{aq}^+$ ,  $H_2$ ,  $H_2O_2$ ,  $OH^-$ ,  $O_2$ ,  $O_2^-$ ,  $HO_2$ ,  $HO_2^-$ ) طورنا هاتين التوزيعتين من خلال مجموعة من الرموز المعلوماتية التي حضرت على نموذج حتمي إلى غاية اصطدامهما و عندها حساب التركيز و المر دودية لكل صنف. في هذه الدراسة لم نعتبر إلا الكائنات الأكثر تفاعلا مع الجزيئات البيولوجية  $e_{aq}^-$ ; H وخاصة الهيدروكسيل OH و قدرنا بالتالي مختلف أضرار ADN.

أردنا من خلال هذه الدراسة الوصول إلى وضع نموذج بسيط يبين الأضرار التي يمكن أن تلحق بجريئة هامة كالـ ADN.

### الكلمات المفتاحية

المعالجة بالأشعة ، مونتيني كرلو، انتشار، توزيع فضائي - زمني، صنف راديكالي، مردود راديكالي.