



Modélisation Monte Carlo / GEANT4-DNA de la chimie radicalaire dans l'eau : nanodosimétrie

Spécialité Chimie-physique

Niveau d'étude Bac+5

Formation Master 2

Unité d'accueil [LIDYL/DICO](#)

Candidature avant le 30-04-2019

Durée 6 mois

Poursuite possible en thèse oui

Contact [BALDACCHINO Gerard](#)
+33 1 69 08 57 02
gerard.baldacchino@cea.fr

Résumé

Le stage a pour objet la dosimétrie à l'échelle de la chimie radicalaire déclenchée par une particule de haute énergie (type photon gamma, electron, proton, ion carbone...), c'est à dire à l'échelle du nano-micromètre. Le logiciel GEANT4-DNA permet de simuler sur une échelle de temps allant de la picoseconde jusqu'à la microseconde ,les évènements physiques (ionisation, excitation) et chimiques (système de reactions). Dans le projet ESPRIT, la détermination de la dose à temps court est primordiale en radiobiologie. Son devenir dans la formation d'espèces chimiques radicalaires et moléculaires sera comparé à des mesures faites sur le laser UHI du laboratoire LIDYL.

Sujet détaillé

Le stage a pour objet la dosimétrie à l'échelle de la chimie radicalaire déclenchée par une particule de haute énergie (type photon gamma, electron, proton, ion carbone...), c'est à dire à l'échelle nano-micromètre. Le logiciel GEANT4-DNA permet de simuler sur une échelle de temps allant de la picoseconde jusqu'à la microseconde ,les évènements physiques (ionisation, excitation) et chimiques (système de reactions). Dans le projet ESPRIT, la détermination de la dose à temps court est primordiale pour son utilisation en radiobiologie et hadronthérapie. Son devenir dans la formation d'espèces chimiques radicalaires et moléculaires sera comparé à des mesures faites sur le laser UHI du laboratoire LIDYL.

Le stagiaire prendra en main le logiciel GEANT4-DNA sur une station de calcul à sa disposition. Les cibles virtuelles seront progressivement complexes, allant de l'eau à la nanoparticule d'or de différentes tailles. Les rayonnements seront aussi variables selon un plan de travail à discuter pour tester l'influence du TEL et de l'énergie de la particule. Puis, la chimie qui est dans GEANT4-DNA, uniquement tournée vers l'eau, inclura de nouvelles molécules pour mimer la réactivité des molécules sonde fluorescentes utilisées dans les expériences de dosimétrie chimique.

Le stagiaire pourra participer à l'une de ses expériences sur le laser UHI du Laboratoire LIDYL.

Un rapport détaillé sera demandé et une participation à l'écriture d'un article aussi.

Mots clés

chimie radicalaire, interaction rayonnement matière, haute énergie, nanoparticule

Compétences

Chimie des solutions, spectroscopie d'absorption, fluorescence Environnement Linux ou Windows virtual machine (VMware) Langage C++

Logiciels

Environnement Linux ou Windows virtual machine (VMware) Langage C++

Monte Carlo Simulation with GEANT4-DNA of radiation chemistry in water : nanodosimetry concept

Summary

Full description

Keywords

Skills

Softwares

Environnement Linux ou Windows virtual machine (VMware) Langage C++