

УДК 530.145.84, 537.56, 537.533.74
PACS 31.15.A-, 34.80.Bm
DOI 10.24144/2415-8038.2020.48.102-112

Ш.Ш. Демеш^{1*}, О.В. Васильєв², Е.Ю. Ремета²

¹Інститут ядерних досліджень (АТОМКІ), 4026, Дебрецен, Угорщина

²Інститут електронної фізики НАН України, 88017, Ужгород, вул. Університетська, 21, Україна,
 e-mail: demessanyi@gmail.com; remetoveyu@gmail.com; vasyliov.oleksandr.1996@gmail.com

* Present address: Normandie University Le Havre, LOMC-UMR 6294 CNRS, 53 rue de Prony, BP 540,
 76058 Le Havre, France

ПОТЕНЦІАЛЬНЕ РОЗСІЮВАННЯ ЕЛЕКТРОНА НА БІОМОЛЕКУЛАХ АМІНОКИСЛОТ ТРЕОНІНУ ТА ТИРОЗИНУ

Наведено методику теоретичного дослідження перерізів потенціального розсіювання електрона на складних молекулах у моделі незалежних атомів. Необхідні для цього амплітуди та перерізи пружного розсіювання електрона на атомах Н, С, N, О, як складових частинах біомолекул амінокислот треоніну і тирозину, знайдено у методі оптичного потенціалу за програмою ELSEPA. У підході Additivity Rule (AR) розраховано диференціальні та інтегральні перерізи пружного розсіювання електрона на цих біомолекулах.

Ключові слова: модель незалежних атомів, амплітуда, фазові зсуви, молекула, оптичний потенціал, переріз.

Вступ

Зіткнення електронів з молекулами відіграють дуже важливу роль в широких областях наукової та технічної сфери. Від досліджень дії іонізуючого випромінювання на клітини, на самі молекули ДНК та на їх складові (амінокислоти) до опису взаємодій у різних плазмових середовищах. Наприклад, взаємодія електрона з атомами та молекулами лежить в основі складних процесів у низькотемпературній молекулярній плазмі.

Абсолютні величини перерізів розсіювання електронів молекулярними мішенями, включаючи їх дочірні радикали, відіграють важливу роль у плазмових реакторах, у вивченні ефективності різних газів для плазмової обробки. Низькоенергетичні дані про зіткнення у цих газах, как правило, достатньо бідні. Тому, у багатьох випадках використовують теорію розсіювання, щоб отримати важливі дані про зіткнення.

Процес потенціального розсіювання частинки молекулою описують такими характеристиками як диференціальні та ін-

тегральні перерізи розсіювання. Важливим є вплив потенціальних складових взаємодії електрона з окремими атомами молекули. Ці складові визначають сумарну взаємодію налітаючого електрона з молекулярною мішенню.

Теоретичний опис потенціального розсіювання електрона молекулою, як багатоатомною системою, вкрай важливий з фундаментальної та прикладної точок зору. Як і у випадку розсіювання електрона на атомі, важливим є вивчення поведінки характеристик розсіювання у великому діапазоні енергій зіткнень: малих (до 10 еВ), середніх (до 100 еВ) та великих (більше 100 еВ).

Для опису такого потенціального розсіювання використовують модель незалежних атомів (МНА або латиною IAM) [1–4]. Вона є відносно простою і достатньо поширеною і базується на використанні результатів розрахунку потенціалів взаємодії, фазових зсувів та амплітуд розсіювання на окремих атомах молекули. В рамках МНА молекулярну мішень розглядають як просту сукупність атомів (без симетрії), які розташовані на певних

відстанях один від одного. Ці відстані є єдиними величинами, які визначають та враховують молекулярну природу мішені при розгляді розсіювання.

Органічні молекули складаються з атомів Н, С, N та О. Так, такі біомолекули як незамінна амінокислота треонін має хімічну формулу $C_4H_9NO_3$, а замінна амінокислота тирозин – $C_9H_{11}NO_3$. Біомолекули також можуть містити низку інших атомів, наприклад, атоми фосфору та сірки (сульфуру).

Дана робота присвячена теоретичному розгляду перерізів пружного розсіювання електрона на атомах гідрогену, вуглецю, азоту, кисню та на молекулах амінокислот треоніну і тирозину. Диференціальні та інтегральні перерізи, розраховуються за програмою ELSEPA [5, 6], що базується на розв'язках рівнянні Дірака та методі оптичного потенціалу (ОП) у якому враховано статичну, обмінну та поляризаційну взаємо-

дії (SEP наближення) і з врахуванням ефектів поглинання (SEPA наближення). Результати співставляємо і порівнюємо для обох молекул.

Модель незалежних атомів розрахунку характеристик потенціального розсіювання електрона молекулою.

Амплітуди та перерізи розсіювання електрона молекулою

Розсіювання електрона з імпульсом k на кут θ молекулою, яка містить N атомів та має певну орієнтацію у просторі, описується амплітудами – прямою $F(\theta, k)$ та з переворотом спіну (spin-flip) $G(\theta, k)$. Вони є сумми амплітуд розсіювання електрона атомами (індекс i) молекули (у моделі незалежних атомів, МНА (IAM підхід) [1–4, 6, 8, 9])

$$F(\theta, k) = \sum_i^N \exp(i\vec{k}\vec{r}_i) f_i(\theta, k), \quad (1)$$

$$G(\theta, k) = \sum_i^N \exp(i\vec{k}\vec{r}_i) g_i(\theta, k). \quad (2)$$

Диференціальний переріз (ДП) розсіювання на такій молекулі буде

$$\frac{d\sigma_{orient}}{d\Omega} = |F(\theta, k)|^2 + |G(\theta, k)|^2 = \sum_{i,j}^N \exp(i\vec{k}\vec{r}_{ij}) [f_i(\theta, k) f_j^*(\theta, k) + g_i(\theta, k) g_j^*(\theta, k)], \quad (3)$$

де $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ міжатомні відстані.

Для вивчення поведінки пружних диференціальних та інтегральних (ІП) – пружного, передачі імпульсу, в'язкості – перерізів потенціального розсіювання електрона на молекулах нами застосовується МНА підхід з методом ОП [5, 6, 10, 11]. Диференціаль-

ний переріз пружного розсіювання електрона на N -атомній молекулі в рамках МНА, усереднений за всіма напрямками випадкової орієнтації молекули, задається виразом [1–4] (використано атомні одиниці – $\hbar/2\pi = e = m_e = 1$):

$$\frac{d\sigma_{el}^{IAM}}{d\Omega} = \langle |F(\theta, k)|^2 + |G(\theta, k)|^2 \rangle = \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N [f_m(\theta, k) f_n^*(\theta, k) + g_m(\theta, k) g_n^*(\theta, k)] \frac{\sin(sr_{nm})}{sr_{nm}}. \quad (4)$$

У наведених виразах величини θ , $f_m(\theta, k)$ та $g_m(\theta, k)$ являють собою кут розсіювання, прямі та спін-повертаючі (“spin-flip”) амплітуди розсіювання на m -му атомі молекули, відповідно; $s = 2k \sin(\theta/2)$, $k = \sqrt{2E}$, де E – енергія налітаючого електрона; r_{nm} – відстань між n -м та m -м атомами в молекулі.

Інакше ДП $d\sigma_{el}^{IAM}/d\Omega$ можна предста-

$$\frac{d\sigma_{el}^{IAM}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{el}^{AR}}{d\Omega} + \sum_{m,n \neq m} [f_m(\theta, k)f_n^*(\theta, k) + g_m(\theta, k)g_n^*(\theta, k)] \frac{\sin(sr_{nm})}{sr_{nm}}. \quad (6)$$

Для молекул амінокислот треоніну і тирозину ДП розсіювання електрона у AR під-

для треоніну ($C_4H_9NO_3$)

$$\frac{d\sigma_{el}^{AR}}{d\Omega} = 4 \frac{d\sigma_{el,C}}{d\Omega} + 9 \frac{d\sigma_{el,H}}{d\Omega} + \frac{d\sigma_{el,N}}{d\Omega} + 3 \frac{d\sigma_{el,O}}{d\Omega}, \quad (7)$$

для тирозину ($C_9H_{11}NO_3$)

$$\frac{d\sigma_{el}^{AR}}{d\Omega} = 9 \frac{d\sigma_{el,C}}{d\Omega} + 11 \frac{d\sigma_{el,H}}{d\Omega} + \frac{d\sigma_{el,N}}{d\Omega} + 3 \frac{d\sigma_{el,O}}{d\Omega}. \quad (8)$$

При описі розсіювання електрона на молекулах у МНА підході поведінка та особливості ДП $d\sigma_{el}^{IAM}/d\Omega$ будуть, в цілому, визначатися кутовими і енергетичними залежностями та їх особливостями – мінімумами та максимумами – ДП $d\sigma_{el,m}/d\Omega$ розсіювання електрона на окремих атомах m . Вважаємо, що хороший опис розсіювання електрона на атомах молекули дозволить також добре описати його розсіювання на молекулі у МНА.

Як бачимо, при використанні підходу МНА у дослідженнях з розсіювання електрона на біомолекулах дуже суттєвим може бу-

вити у вигляді суми сумарного ДП розсіювання на кожному з атомів (це прямий доданок, який дає основний внесок) згідно правила сум (підхід “Additivity Rule”, AR підхід)

$$\sum_{m=1}^N \frac{d\sigma_{el,m}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{el}^{AR}}{d\Omega}, \quad (5)$$

та інтерференційного (непрямого) доданку:

ході буде дорівнювати таким сумах ДП на їх атомах С, Н, N, O:

ти вплив особливостей їх будови. Біомолекули, навіть такі відносно прості як амінокислоти, мають складну будову – вони складаються зі структурних елементів, що містять певну кількість атомів. Адекватне врахування цих особливостей структури є важливою науковою задачею при дослідженнях біомолекул та їх взаємодії з частинками.

Інтегральний переріз пружного розсіювання $\sigma_{el}^{Ad}(E)$ можна визначити за оптичною теоремою [1–4, 12]. Для МНА ця теорема співпадає з підходом “Additivity Rule”. Використовуючи $\sin(sr_{nm})/sr_{nm}|_{\theta \rightarrow 0} \rightarrow 1$ та $\sin(sr_{nm})/sr_{nm}|_{r_{nm} \rightarrow 0} \rightarrow 1$ маємо:

$$\sigma_{el}^{AR}(E) = \frac{4\pi}{k} \text{Im}F(\theta = 0, k) = \frac{4\pi}{k} \sum_{m=1}^N \text{Im}[f_m(\theta = 0, k)] = \sum_{m=1}^N \sigma_{el,m}(E). \quad (9)$$

У випадку біомолекул амінокислот треоніну та тирозіну ДП розсіювання електрона у AR підході буде дорівнювати таким

сумам перерізів розсіювання на їх атомах С, Н, N, O

$$\sigma_{el}^{AR}(E) = 4\sigma_{el,C}(E) + 9\sigma_{el,H}(E) + \sigma_{el,N}(E) + 3\sigma_{el,O}(E), \quad (10)$$

$$\sigma_{el}^{AR}(E) = 9\sigma_{el,C}(E) + 11\sigma_{el,H}(E) + \sigma_{el,N}(E) + 3\sigma_{el,O}(E). \quad (11)$$

Зауважимо, що ІП передачі імпульсу $\sigma_{mom}^{AR}(E)$ та в'язкості $\sigma_{vis}^{AR}(E)$ у підході "AR" можна визначити за ДП $d\sigma_{el}^{AR}/d\Omega$ з використанням вагових функцій $(1 - \cos \theta)$ та $\sin^2 \theta$, відповідно.

Підхід МНА справедливий при умовах [2]: $k(r_{nm})_{min} \gg 1$ – достатньо швидкий електрон та $(r_{nm})_{min} \gg (a)_{max}$ – однократне розсіювання на атомах. Тут $(r_{nm})_{min}$ мінімальна відстань між атомами та $(a)_{max}$ максимальний радіус взаємодії частинки з кожним атомом. З нашого досвіду вивчення потенціального розсіювання електрона на молекулах зауважимо наступне. Виявляється, що у підході ІАМ краще описується кутова поведінка ДП (більша величина при малих кутах та структура типу мінімум-максимум), а у підході AR краще описується величина та енергетична поведінка ІП розсіювання. Збільшення енергії електронів, до декіль-

кох десятків електронвольтів, при зіткненні з молекулою, призводить до того, що опис у обох підходах стає схожим. У даній роботі, у якості перших розрахунків обох типів перерізів розсіювання електрона на біомолекулах треоніну і тирозину ми використаємо підхід AR, без врахування інтерференційних доданків.

Амплітуди та перерізи розсіювання електрона атомом

Амплітуди розсіювання електрона на атомі можна знайти за дійсними $\delta_{\ell}^{\pm}(E) = \varepsilon_{\ell}^{\pm}(E)$ (для дійсного ОП взаємодії, SEP наближення) або за комплексними $\delta_{\ell}^{\pm}(E) = \varepsilon_{\ell}^{\pm}(E) + i\mu_{\ell}^{\pm}(E)$ (для комплексного ОП, з врахуванням ефектів поглинання, SEPA наближення) парціальними фазовими зсувами [11, 13]. Амплітуди розсіювання, через дійсні парціальні фазові зсуви мають вигляд

$$f_m(\theta, E) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} \{ (\ell + 1) [\exp(2i\varepsilon_{\ell}^+) - 1] + \ell [\exp(2i\varepsilon_{\ell}^-) - 1] \} P_{\ell}(\cos(\theta)), \quad (12)$$

$$g_m(\theta, E) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=1}^{\infty} [\exp(2i\varepsilon_{\ell}^-) - \exp(2i\varepsilon_{\ell}^+)] P_{\ell}^1(\cos(\theta)). \quad (13)$$

Амплітуди розсіювання через комплексні парціальні фазові зсуви мають наступний вигляд

$$f_m(\theta, E) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left\{ (\ell + 1) \left[\frac{\exp(2i\varepsilon_{\ell}^+)}{\exp(2\mu_{\ell}^+)} - 1 \right] + \ell \left[\frac{\exp(2i\varepsilon_{\ell}^-)}{\exp(2\mu_{\ell}^-)} - 1 \right] \right\} P_{\ell}(\cos(\theta)), \quad (14)$$

$$g_m(\theta, E) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=1}^{\infty} \left[\frac{\exp(2i\varepsilon_{\ell}^-)}{\exp(2\mu_{\ell}^-)} - \frac{\exp(2i\varepsilon_{\ell}^+)}{\exp(2\mu_{\ell}^+)} \right] P_{\ell}^1(\cos(\theta)). \quad (15)$$

У цих виразах $P_{\ell}(\cos \theta)$ – многочлени Лежандра та $P_{\ell}^1(\cos \theta)$ – приєднані функції Лежандра першого роду.

Важливо зауважити, що наявність опублікованих даних з розрахованих парціальних фазових зсувів розсіювання електрона на різних атомах дозволяє їх використання для розрахунків у МНА характеристик розсіювання молекулами, що складаються з цих атомів. При цьому бажано, щоб були використані фазові зсуви, розраховані у одному підході, теорії, методі, наближенні. Але, для певних оцінок можна використовувати пар-

ціальні фазові зсуви, знайдені у різних підходах.

Для пружного розсіювання електрона на атомі ДП так визначається амплітудами

$$\frac{d\sigma_{el}(E, \theta)}{d\Omega} = |f(E, \theta)|^2 + |g(E, \theta)|^2, \quad (16)$$

а ІП пружний, поглинання, передачі імпульсу та в'язкості можна знайти за цим ДП. Повний ІП розсіювання електрона на атомі є сумою ІП пружного розсіювання та поглинання.

Перерізи розсіювання електрона на атомах Н, С, N, О та біомолекулах треоніну та тирозину

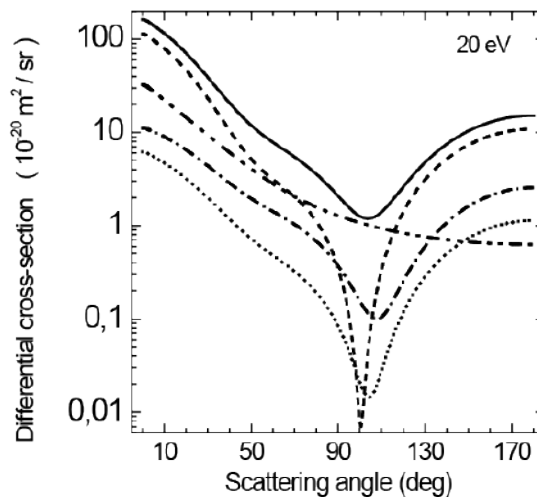
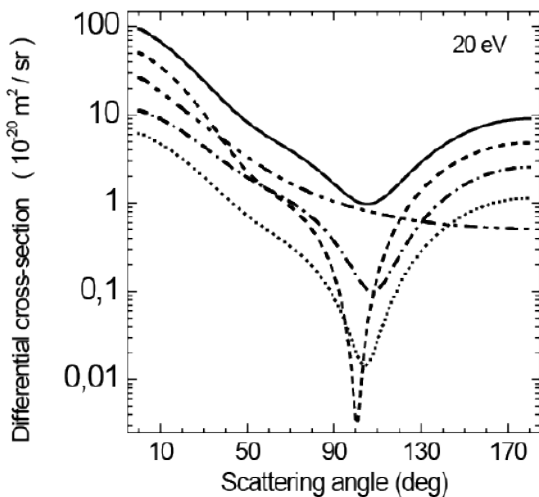
Нами розраховано ДП та ІП розсіювання електрона на молекулах треоніну і тирозину у підході AR. Відповідні перерізи розсіювання електрона на атомах Н, С, N, О розраховані за програмою ELSEPA [5, 6] у SEPA наближенні.

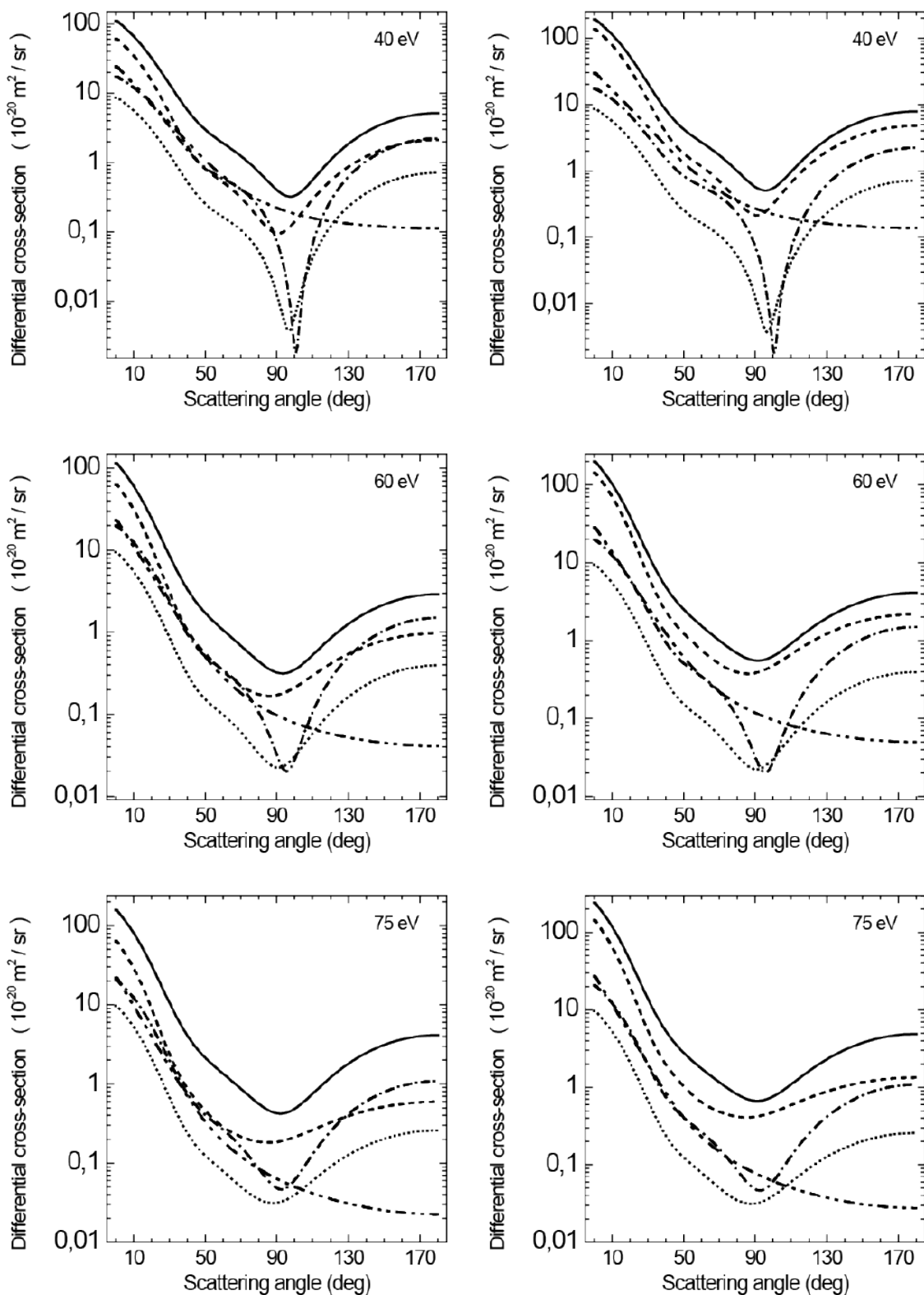
На рис. 1 представлено кутові залежності ДП пружного розсіювання електрона на молекулах треоніну і тирозину при енергіях 20, 40, 60, 75, 100, 150 eV, розраховані у підході AR. Там також представлено сумарні ДП розсіювання електрона на атомах одного типу, що входять до складу цих молекул. Ці атомарні ДП дозволяють оцінити їх внесок у ДП розсіювання на молекулі для різних кутів.

Як бачимо з рис. 1 кутова поведінка ДП пружного розсіювання електрона на біомолекулах амінокислот треоніну та тирозину достатньо гладка та характеризується широким мінімумом. Цей мінімум зі збільше-

нням енергії зіткнення розширюється. Його наявність в основному зобов'язана поведінкою перерізів розсіювання на атомах вуглецю та кисню. Основний внесок у формування кутової залежності у всьому діапазоні кутів, за виключенням областей мінімумів, цих ДП дають перерізи розсіювання на атомах вуглецю (4 атоми для треоніну і 9 для тирозину), гідрогену (9 атомів і 11) та кисню (по 3 атоми). Внесок від атомів азоту (1 атом) значно менший. При енергії зіткнення 150 eV внесок від атомів гідрогену вже наближений до внеску атома азоту при кутах до $\sim 70^\circ$ та стає меншим при більших кутах.

На рис. 2 представлено розраховані енергетичні залежності ІП розсіювання електрона на біомолекулах треоніну та тирозину та сумарних (за атомами одного типу) ІП пружного розсіювання електрона атомами Н, С, N, О. Поведінка ІП пружного розсіювання електрона на біомолекулах амінокислот треоніну та тирозину достатньо гладка. Бачимо, що основний внесок у формування енергетичної залежності ІП розсіювання на цих біомолекулах та їх величину дають





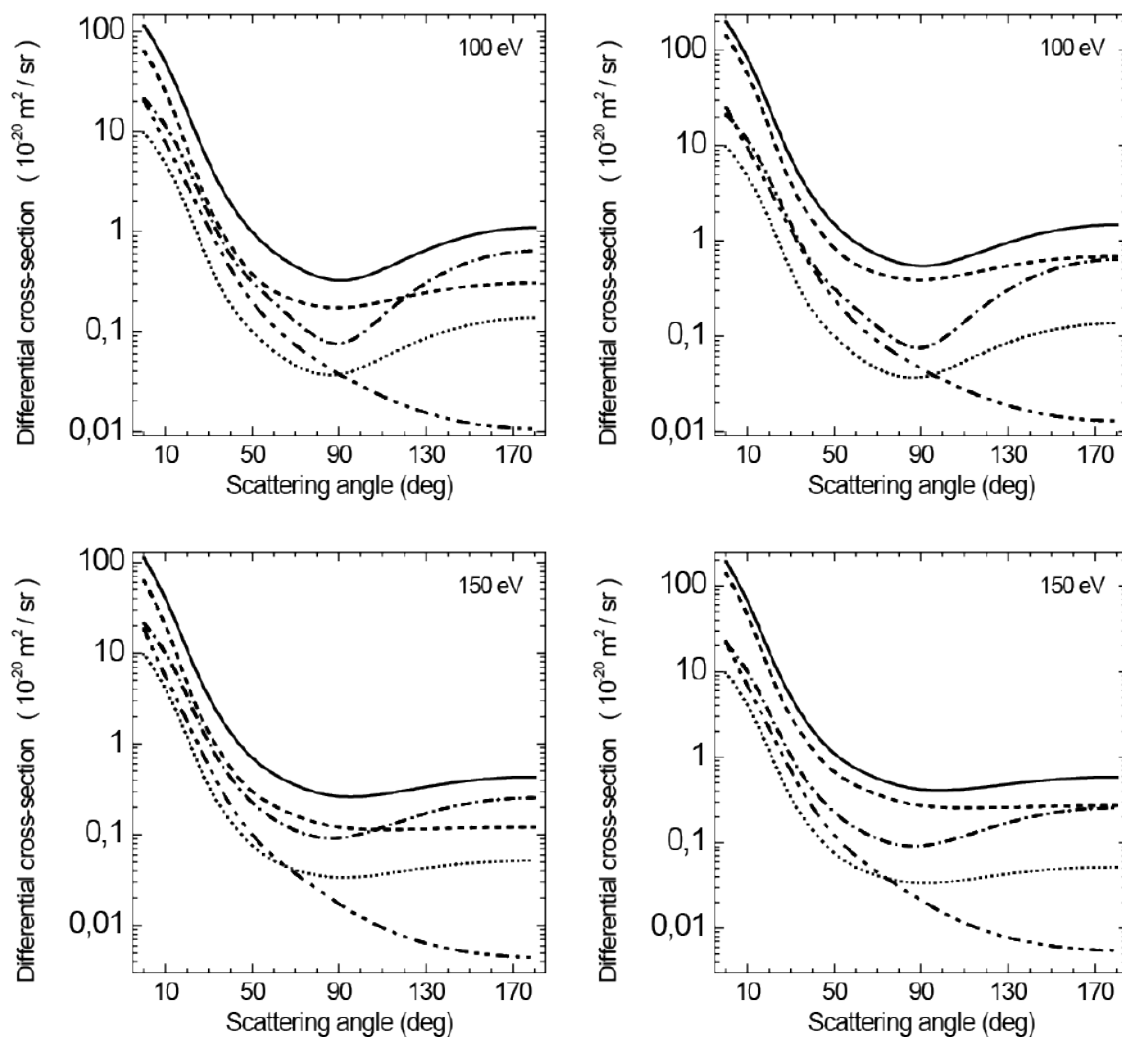


Рис. 1: Теоретичні розрахунки диференціальних перерізів пружного розсіювання електрона на біомолекулах (—) треоніну (зліва) та тирозину (справа) у AR підході при енергіях 20, 40, 60, 75, 100, 150 еВ. Сумарні перерізи розсіювання електрона на атомах біомолекул: треоніну (зліва) $9d\sigma_{el,H}/d\theta$ (- · · - · · -), $4d\sigma_{el,C}/d\theta$ (- - -), $d\sigma_{el,N}/d\theta$ (· · ·), $3d\sigma_{el,O}/d\theta$ (- · - · -); тирозину (справа) $11d\sigma_{el,H}/d\theta$ (- · · - · · -), $9d\sigma_{el,C}/d\theta$ (- - -), $d\sigma_{el,N}/d\theta$ (· · ·), $3d\sigma_{el,O}/d\theta$ (- · - · -).

атоми гідрогену (9 атомів для треоніну і 11 для тирозіну) та вуглецю (4 атоми для треоніну і 9 для тирозіну). При цьому внесок від атомів гідрогену швидко спадає від максимальної величини при малих, 1 еВ, енергіях до 20-25 еВ. Внесок від атомів вуглецю

спадає значно повільніше – від максимального значення при 4 еВ до 1000 еВ. Три атоми оксигену та один атом азоту дають незначні внески у інтегральні перерізи розсіювання електрона цими біомолекулами.

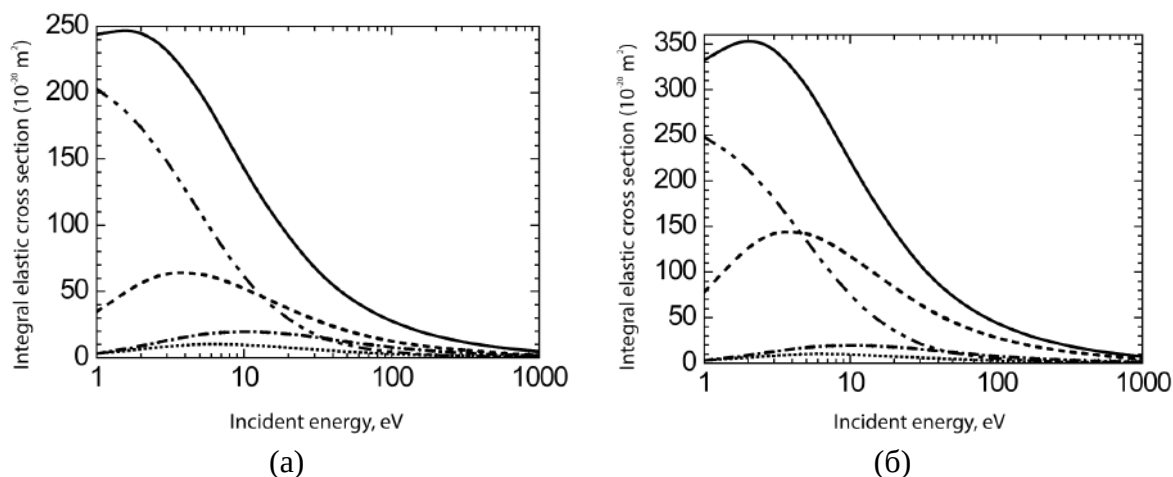


Рис. 2: Теоретичні розрахунки інтегральних перерізів пружного розсіювання електрона на біомолекулах (—) треоніну (а) та тирозину (б) у AR підході. Сумарні перерізи розсіювання електрона на атомах біомолекул: (а) $9\sigma_{el,H}$ ($-\cdot\cdot-\cdot\cdot-$), $4\sigma_{el,C}$ ($- - -$), $\sigma_{el,N}$ ($\cdot\cdot\cdot$), $3\sigma_{el,O}$ ($-\cdot\cdot-\cdot\cdot-$); (б) $11\sigma_{el,H}$ ($-\cdot\cdot-\cdot\cdot-$), $9\sigma_{el,C}$ ($- - -$), $\sigma_{el,N}$ ($\cdot\cdot\cdot$), $3\sigma_{el,O}$ ($-\cdot\cdot-\cdot\cdot-$).

У подальших дослідженнях важливим буде використання більш точного методу розрахунку характеристик розсіювання електрона на атомах молекули за методом оптичного потенціалу (як, наприклад, у роботі [13], т. зв. RSEP і RSEPA наближення). Найважливішим подальшим розвитком опису потенціального розсіювання електрона молекулою є такий, у якому використовують оптичний потенціал, що містить взаємодію електрона з мішенню в цілому.

Висновки

Викладено методіку розрахунку характеристик потенціального розсіювання електрона на складних молекулах у моделі незалежних атомів. Для випадку біомолекул амінокислот треоніну та тирозину розраховані перерізи пружного розсіювання електрона у підході Additivity Rule. В цьому підході переріз розсіювання електрона на молекулі знаходиться сумуванням відповідних перерізів його розсіювання на атомах цієї молекули.

Поведінка перерізів пружного розсіювання електрона на молекулах амінокислот треоніну та тирозину – кутова у випадку диференціальних та енергетична для інтегральних – достатньо гладка. Диференціальний переріз розсіювання електрона на молекулах характеризується широким мінімумом який

розширюється зі збільшенням енергії зіткнення. Його поява зобов'язана поведінкою перерізів розсіювання електрона атомами вуглецю та кисню.

Основний внесок у формування кутової залежності у всьому діапазоні кутів, за виключенням областей мінімумів, цих диференціальних перерізів дає розсіювання на атомах вуглецю, кисню та гідрогену. Значно менші внески у ці перерізи розсіювання на молекулах є від атома азоту. Внески у ці перерізи розсіювання електрона на молекулі від атомів гідрогену та азоту достатньо суттєво залежать від енергії електрона.

Основний внесок у формування енергетичної залежності інтегральних перерізів розсіювання на молекулах дає розсіювання на атомах гідрогену та вуглецю. При цьому внесок від атомів гідрогену швидко спадає від максимальної величини при малих енергіях до $\sim 20 - 25$ еВ. Внесок від атомів вуглецю спадає повільніше – від максимального значення при малих енергіях до 1000 еВ. Три атоми кисню та один атом азоту дають незначні внески у інтегральні перерізи розсіювання на цих молекулах.

Важливим є подальше дослідження поведінки диференціальних перерізів пружного розсіювання електрона на молекулі провести у підході IAM, з врахуванням інтерференційних доданків, що містять добуток амплітуд розсіювання на атомах.

Дане дослідження було виконано за часткової фінансової підтримки з боку Українського національного фонду досліджень (грант № 2020.01 / 0009 «Вплив іонізуючого випромінювання на структуру молекул амінокислот»)

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Raj D. A note on the use of the additivity rule for electron-molecule elastic scattering // *Phys. Lett. A* – 1991. – V.160. – P.571-574.
- [2] Мотт Р., Мессі Г. Теория атомных столкновений. – М., Мир, 1969. 756с.
- [3] Mozejko P., Zywicka-Mozejko B., Szmytkowski Cz. Elastic cross-section calculations for electron collisions with XY_4 ($X=Si, Ge; Y=H, F, Cl, Br, I$) molecules // *Nucl. Instr. Meth. B.* – 2002. – V.196. – P.245-252.
- [4] Mozejko P., Zywicka-Mozejko B., Szmytkowski Cz. Elastic cross section calculations for electron scattering on polyatomic molecular targets: XY_4 ($X=C, Si, Ge; Y=H, F, Cl$), XF_6 ($X=S, W, U$), C_2F_6 and C_6Y_6 ($Y=H, F$) // *Наук. Вісник Ужгород. універ. Сер. Фіз.* – 2000. – Вип. 8. – Ч. 1. – С.108-111.
- [5] Salvat F., Jablonski A., Powell C.J. ELSEPA – Dirac partial-wave calculation of elastic scattering of electrons and positrons by atoms, positive ions and molecules // *Comp. Phys. Commun.* – 2005. – 165. – P.157–190. DOI:10.1016/j.cpc.2004.09.006
- [6] Salvat F. Optical-model potential for electron and positron elastic scattering by atoms // *Phys. Rev. A* – 2003. – V.68. – P.012708. DOI: 10.1103/PhysRevA.68.012708
- [7] Raj D. Cross sections for $e-CF_4$ elastic scattering at intermediate energies // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1991. – V.24. – L431.
- [8] Khare S.P., Raj D., Sinha P. Absorption effects in the elastic scattering of electrons by the CF_4 molecule at intermediate energies // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1994. – V.27. – P.2569-2576.
- [9] Yates A.C. Spin polarization of low-energy electrons scattered elastically from atoms and molecules // *Phys. Rev.* – 1968. – V.176. – N1. – P.173-180.
- [10] Demesh, Sh.Sh., Kelemen V.I., Remeta E.Yu. Potential electron scattering by P_2 and P_3 phosphorus molecules // *Ukr. J. Phys.* – 2016. V.61(4). – С.291–300. DOI:10.15407/ujpe61.04.0291
- [11] Демеш Ш.Ш., Келемен, В.І., Ремета, Е.Ю. Потенціальне розсіювання електрона молекулою // *ЖФД.* – 2016. – V.19(4). – С.4301 (6с).
- [12] Бэрк Ф.Дж. Потенциальное рассеяние в атомной физике. – М., Атомиздат, 1980. 101с.
- [13] Demesh Sh.Sh., Kelemen V.I., Remeta E.Yu. Elastic electron scattering by the CF_3 radical in the 1–1000 eV energy range // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2017. – V.50. – P.135201 (11pp). DOI:10.1088/1361-6455/aa739f

Стаття надійшла до редакції 17.12.2020

Ш.Ш. Демеш¹, О.В. Васильев², Е.Ю. Ремета²

¹Институт ядерных исследований (АТОМКИ), 4026, Дебрецен, Венгрия

²Институт электронной физики НАН Украины, 88017, Университетская 21, Ужгород, Украина, e-mail: demessanyi@gmail.com; remetoveyu@gmail.com; vasyliov.oleksandr.1996@gmail.com

ПОТЕНЦИАЛЬНОЕ РАССЕЙЯНИЕ ЭЛЕКТРОНА НА БИМОЛЕКУЛАХ АМИНОКИСЛОТ ТРЕОНИНЕ И ТИРОЗИНЕ

Представлена методика теоретического исследования сечений потенциального рассеяния электрона на сложных молекулах в модели независимых атомов. Необходимые для этого амплитуды и сечения упругого рассеяния электрона на атомах Н, С, N, О, составляющих биомолекулы аминокислот треонина и тирозина, найдены методом оптического потенциала по программе ELSEPA. В подходе Additivity Rule (AR) рассчитаны дифференциальные (ДС) и интегральные (ИС) сечения упругого рассеяния электрона этими биомолекулами.

Ключевые слова: модель независимых атомов, амплитуда, фазовые сдвиги, молекула, оптический потенциал, сечение

Sh. Demes¹, O. Vasyliov², E. Remeta²

¹Institute for Nuclear Research (АТОМКИ), 4026, Debrecen, Hungary

²Institute of electron physics National academy of sciences of Ukraine, 88017, 21, University Str., Uzhhorod, Ukraine, e-mail: demessanyi@gmail.com; remetoveyu@gmail.com; vasyliov.oleksandr.1996@gmail.com

POTENTIAL ELECTRON SCATTERING BY THE THREONINE AND TYROSINE AMINO ACID BIOMOLECULES

Purpose. The article is devoted to brief exposition of methodics of description of potential electron scattering on complex molecules. In the Additivity Rule approach the differential and integral cross-sections of elastic electron scattering by amino acids biomolecules, threonine and tyrosine are calculated.

Methods. Expressions for amplitudes and cross sections of electron scattering on molecules in the independent atoms model were given. The Additivity Rule approach was described. Expressions for amplitudes and differential cross sections of electron scattering on the atoms of which the molecule consists were given. The scattering phase shifts are calculated in the optical potential method of the ELSEPA program.

Results. Amplitudes, differential and integral cross sections of elastic electron scattering on hydrogen, carbon, nitrogen, oxygen atoms and on amino acid biomolecules of threonine and tyrosine were calculated. The graphical comparison of angular, for differential, and energy, for integral, dependencies of scattering cross sections by molecules showed a qualitative similarity of their behavior.

Conclusions. The expressions and the accompanying concepts necessary for calculation of the cross sections of elastic electron scattering by complex molecules were considered. The independent atoms model and the Additivity Rule approach used for this were summarized. Using the ELSEPA program, the amplitudes and cross sections of the elastic electron scattering by the H, C, N, O atoms, which are components in the structure of the amino acids threonine and tyrosine biomolecules, were calculated. The differential cross section of electron scattering on these biomolecules is

characterized by a wide minimum due to the electron scattering by the carbon and oxygen atoms. The main contribution to this cross section is given by electron scattering on carbon, oxygen and hydrogen atoms and to integral cross sections from the electron scattering on hydrogen and carbon atoms.

Keywords: independent atom model, amplitude, phase shifts, molecule, optical potential, cross section.

REFERENCES

- [1] Raj D. A note on the use of the additivity rule for electron-molecule elastic scattering // *Phys. Lett. A* – 1991. – V.160. – P.571-574.
- [2] Мотт Р., Мессси Г. Теория атомных столкновений. – М., Мир, 1969. 756с.
- [3] Mozejko P., Zywicka-Mozejko B., Szmytkowski Cz. Elastic cross-section calculations for electron collisions with XY_4 ($X=Si, Ge; Y=H, F, Cl, Br, I$) molecules // *Nucl. Instr. Meth. B.* – 2002. – V.196. – P.245-252.
- [4] Mozejko P., Zywicka-Mozejko B., Szmytkowski Cz. Elastic cross section calculations for electron scattering on polyatomic molecular targets: XY_4 ($X=C, Si, Ge; Y=H, F, Cl$), XF_6 ($X=S, W, U$), C_2F_6 and C_6Y_6 ($Y=H, F$) // *Наук. Вісник Ужгород. універ. Сер. Фіз.* – 2000. – Вип. 8. – Ч. 1. – С.108-111.
- [5] Salvat F., Jablonski A., Powell C.J. ELSEPA – Dirac partial-wave calculation of elastic scattering of electrons and positrons by atoms, positive ions and molecules // *Comp. Phys. Commun.* – 2005. – 165. – P.157–190. DOI:10.1016/j.cpc.2004.09.006
- [6] Salvat F. Optical-model potential for electron and positron elastic scattering by atoms // *Phys. Rev. A* – 2003. – V.68. – P.012708. DOI: 10.1103/PhysRevA.68.012708
- [7] Raj D. Cross sections for e– CF_4 elastic scattering at intermediate energies // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1991. – V.24. – L431.
- [8] Khare S.P., Raj D., Sinha P. Absorption effects in the elastic scattering of electrons by the CF_4 molecule at intermediate energies // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1994. – V.27. – P.2569-2576.
- [9] Yates A.C. Spin polarization of low-energy electrons scattered elastically from atoms and molecules // *Phys. Rev.* – 1968. – V.176. – N1. – P.173-180.
- [10] Demesh, Sh.Sh., Kelemen V.I., Remeta E.Yu. Potential electron scattering by P_2 and P_3 phosphorus molecules // *Ukr. J. Phys.* – 2016. V.61(4). – С.291–300. DOI:10.15407/ujpe61.04.0291
- [11] Демеш Ш.Ш., Келемен, В.І., Ремета, Е.Ю. Потенціальне розсіювання електрона молекулою // *ЖФД.* – 2016. – V.19(4). – С.4301 (6с).
- [12] Бэрк Ф.Дж. Потенциальное рассеяние в атомной физике. – М., Атомиздат, 1980. 101с.
- [13] Demesh Sh.Sh., Kelemen V.I., Remeta E.Yu. Elastic electron scattering by the CF_3 radical in the 1–1000 eV energy range // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2017. – V.50. – P.135201 (11pp). DOI:10.1088/1361-6455/aa739f