



ID de Contribution: 422

Type: Poster

## Vers une compréhension de l'influence d'interactions non covalentes sur la réactivité : une étude théorique de la formation de la méthylacétamide

Avec le perfectionnement des télescopes, la détection de molécules dans le milieu interstellaire a connu de grands progrès. En 1974, la méthylamine fut découverte dans le nuage interstellaire Sagittarius B2, soit 4 ans après la détection de l'eau dans ce même nuage.[1,2] Également, c'est en 2006 que l'on découvre l'acétamide, produit impliquant la formation d'une liaison de type peptidique.[3] La compréhension de la formation de telle liaison dans ce type de milieu est un défi, en raison des très basses températures et pressions qui y règnent. Pour autant, ces liaisons de type peptidique présentent un réel intérêt biochimique, prébiotique et astrochimique.[4]

Ainsi, nous avons démontré, que la formation d'une liaison de ce type (réaction entre l'acide acétique et la méthylamine conduisant à la formation de la méthylacétamide) peut être « facilitée » par la présence de quelques molécules d'eau traitées de manière explicites. [5] Cette étude a été réalisée en DFT (Density Functional Theory) et avec la théorie quantique des atomes dans la molécule [6,7,8] (QTAIM) permettant de caractériser les interactions non-covalentes, ainsi que les liaisons covalentes le long du chemin réactionnel. La complémentarité de ces deux méthodes permet de suivre l'évolution de l'ensemble des liaisons au cours de la formation de la méthylacétamide et ainsi, d'identifier l'impact de l'ajout d'une à quatre molécules d'eau explicites à savoir, la synchronicité de la réaction.

[1] Kaifu N., Morimoto M., Nagane K., Akabane K., Iguchi T., Takagi K., ApJ, 191, 1974, 135-137

[2] Cheung A., Rank D., Townes C., Thornton D., Welch W., Nature, 1969, 221, 626

[3] Hollis J., Lovas F., Remijan A., Jewell P., Ilyushin V., Kleiner I., ApJ, 643, 2006, 25-28

[4] G. Danger, L. Le Sergeant d'Hendecourt, L'actualité chimique, 363, 2012, 31-35

[5] Derbali I., Aroule O., Hoffmann G., Thissen R., Alcaraz C., Romanzin C., Zins E.-L., Theor.Chem.Acc. 2022, 141, 34.6

[6] P. Hohenberg, Physical Review, 136, 1964 no 3B, 864-871

[7] W.Kohn, Physical Review, 140, 1965, 1133-1138

[8] R. Bader., USA: Oxford University Press, 1994

### Affiliation de l'auteur principal

MONARIS - Sorbonne-Université

**Auteurs principaux:** ZINS, Emilie-Laure (Sorbonne Université); AROULE, Olivier (Sorbonne Université)

**Orateur:** AROULE, Olivier (Sorbonne Université)

**Classification de Session:** Session Poster 1: MC3, MC5, MC6, MC11, MC13, MC15, MC16, MC18, MC19, MC25, REDP, posters hors MC

**Classification de thématique:** MC13 Effets d'environnement et de solvatation sur les processus moléculaires