



ID de Contribution: 169

Type: Poster

Observation de dichroïsme circulaire de photoélectrons induit sur un chromophore achiral

Le dichroïsme circulaire de photoélectrons (PECD) permet de mesurer l'asymétrie avant/arrière de la distribution angulaire des photoélectrons par rapport à l'axe de propagation de la lumière suite à l'ionisation d'une molécule chirale par une lumière polarisée circulairement.[1] Le PECD est une méthode autorisée dans l'approximation dipolaire électrique, le rendant beaucoup plus intense, jusqu'à 40%, que des méthodes chiroptiques classiques limitées à moins de 1%.

La complexation d'un chromophore chirale avec un hôte chirale peut induire une chiralité sur la partie achirale. Ce phénomène a déjà été observé par dichroïsme circulaire électronique (ECD) ou vibrationnel (VCD).[2-6] Après identification des structures du complexe formé en phase gazeuse grâce à des mesures de spectroscopies électronique et vibrationnelle (REMPI et double résonance IR-UV), nous présentons ici pour la première fois la mesure d'une signature spectroscopique chirale de PECD en phase gazeuse induite sur le phénol suite à sa complexation avec le R ou le S-méthylloxirane chirale. L'ionisation du complexe en dessous du seuil d'ionisation du méthylloxirane conduit à l'éjection d'un électron du cycle aromatique du phénol achiral avec un PECD de l'ordre de 5 %. Cette chiralité induite résulte d'un effet à longue portée ($\sim 5 \text{ \AA}$) du potentiel chirale qui diffuse l'électron provenant du chromophore achiral.

- [1] S. Daly, M. Tia, G. A. Garcia, L. Nahon, I. Powis, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2016, 55, 11054–11058
 [2] Nicu, V. P.; Debie, E.; Herrebout, W.; Van der Veken, B.; Bultinck, P.; Baerends, E. J. A VCD Robust Mode Analysis of Induced Chirality: The Case of Pulegone in Chloroform. *Chirality* 2009, 21 (1E), E287-E297.
 [3] Sadlej, J.; Dobrowolski, J. C.; Rode, J. E. VCD spectroscopy as a novel probe for chirality transfer in molecular interactions. *Chemical Society Reviews* 2010, 39 (5), 1478-1488.
 [4] Crassous, J. Chiral transfer in coordination complexes: towards molecular materials. *Chemical Society Reviews* 2009, 38 (3), 830-845.
 [5] Neugebauer, J. Couplings between electronic transitions in a subsystem formulation of time-dependent density functional theory. *Journal of Chemical Physics* 2007, 126 (13).
 [6] Hong, A.; Moon, C. J.; Jang, H.; Min, A.; Choi, M. Y.; Heo, J.; Kim, N. J. Isomer-Specific Induced Circular Dichroism Spectroscopy of Jet-Cooled Phenol Complexes, with (-)-Methyl L-Lactate. *Journal of Physical Chemistry Letters* 2018, 9 (3), 476-480.

Affiliation de l'auteur principal

ISMO - CNRS - Université Paris Saclay

Auteurs principaux: ZEHNACKER-RENTIEN, Anne; M. ROUQUET, Etienne (ISMO - CNRS - Université Paris Saclay); Dr GARCIA, Gustavo A. (Synchrotron SOLEIL); Mme DUPONT, Jennifer (ISMO- CNRS- Université Paris Saclay); Dr NAHON, Laurent (Synchrotron SOLEIL); Mme ROY-CHOWDHURY, Madhusree (Synchrotron SOLEIL); LEPÈRE, Valéria (ISMO - CNRS - Université Paris Saclay)

Orateur: LEPÈRE, Valéria (ISMO - CNRS - Université Paris Saclay)

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 solvataion sur les processus moléculaires