



ID de Contribution: 238

Type: Contribution orale

Dichroïsme Circulaire de Photoélectron (PECD) spécifique en conformère à deux photons du 1-indanol

jeudi 6 juillet 2023 09:15 (15 minutes)

Dans le cadre de la reconnaissance moléculaire entre molécules chirales, qui joue un rôle par exemple dans l'activité de médicaments chiraux, il est important de prendre en compte la structure des molécules, à la fois par leur configuration absolue mais aussi leur conformation. Le dichroïsme circulaire de photoélectron (PECD) est l'asymétrie avant/arrière dans la distribution angulaire des électrons émis par la photoionisation d'une molécule chirale à l'aide d'une lumière polarisée circulairement ¹, étudié historiquement à l'aide du rayonnement synchrotron (SR). Le PECD est une sonde très sensible à la structure moléculaire ^{2, 3, 4}. Bien qu'il soit possible d'utiliser des moyens détournés pour discriminer en conformère lors d'expériences utilisant le SR ², l'utilisation d'un laser ns et d'un schéma énergétique à deux photons passant par un état résonnant (RE2PI) permet la sélection des conformères grâce à cet état électronique excité.

Nous avons, pour la première fois, enregistrés des spectres de PECD sélectifs en conformère, pour la molécule d'1-indanol. Cette molécule, bien connue par notre groupe ^{2, 5, 6, 7}, présente deux conformères majoritaires. Selon un mouvement d'inversion de cycle, le groupement -OH peut ainsi se trouver en position pseudo-axiale ou pseudo-équatoriale ⁵. Ces premiers résultats ouvrent la voie au développement du PECD en tant qu'outil analytique, utilisant des sources de lumière plus accessibles que le SR, tout en offrant des informations complémentaires, en particulier sur le paysage conformationnel d'une molécule.

1. I. Powis, J. Chem. Phys. (2000), 112, 1
2. J. Dupont, V. Lepère, A. Zehnacker, S. Hartweg, G. A. Garcia, L. Nahon, J. Phys. Chem. Lett. (2022), 13, 2313-2320
3. R. Hadidi, D. K. Božanić, H. Ganjitabar, G. A. Garcia, I. Powis, L. Nahon, Commun. Chem. (2021) 4, 72
4. S. Turchini, J. Phys. : Condens. Matter (2017), 29, 503001
5. K. Le Barbu-Debus, F. Lahmani, A. Zehnacker, N. Guchhait, S. S. Panja, T. Chakraborty, J. Chem. Phys. (2006), 125, 174305
6. A. Bouchet, J. Altnöder, M. Broquier, A. Zehnacker, J. Mol. Struct. (2014), 1076, 344-351
7. J. Altnöder, A. Bouchet, J. J. Lee, K. E. Otto, M. A. Suhm, A. Zehnacker, Phys. Chem. Chem. Phys. (2013), 15, 10167

Affiliation de l'auteur principal

ISMO / Synchrotron SOLEIL

Auteur principal: ROUQUET, Etienne (ISMO / Synchrotron SOLEIL)

Co-auteurs: ZEHNACKER-RENTIEN, Anne; GARCIA, Gustavo A. (Synchrotron SOLEIL); NAHON, Laurent; LEPÈRE, Valéria (ISMO - CNRS - Université Paris Saclay)

Orateur: ROUQUET, Etienne (ISMO / Synchrotron SOLEIL)

Classification de Session: Mini-colloques: MC13 Effets d'environnement et de solvatation sur les processus moléculaires

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