



université  
PARIS-SACLAY

LABORATOIRE INTERACTIONS, DYNAMIQUES ET LASERS

LIDYL

LIDYL-ERL 9000

CEA, CNRS, Université Paris-Saclay

# THESE LIDYL

Jeremy DONON  
Groupe LUMO

**Le Jeudi 2 Juillet 2020 à 10H00**

**INSTN, Centre CEA de Saclay, 91191, Gif-sur-Yvette**

**Soutenance ouverte au public exclusivement par visioconférence**

<https://eu.bbcollab.com/collab/ui/session/guest/d95ccef53a4444fda5bb361d50b3aeb2>

**"Caractérisation de paires d'ions par spectroscopies IR, UV et rayons X, interprétées par calculs de chimie quantique"**

Les paires d'ions sont omniprésentes dans la nature, depuis l'eau de mer, les aérosols, jusqu'aux organismes vivants. Elles influencent les propriétés des solutions concentrées en ions, et jouent ainsi un rôle majeur dans divers réactions chimiques et processus biologiques. Cependant, leur caractérisation se heurte à une double difficulté : d'une part, plusieurs types de paires coexistent, et d'autre part, ce sont des espèces transitoires en solution.

Dans ce contexte, cette thèse présente trois axes de recherche où l'étude des paires d'ions isolées, microsolvatées et en solution a été abordée par des approches originales. Le premier axe consiste à étudier l'effet du champ électrique produit par une paire d'ions sur la spectroscopie électronique d'un chromophore UV (Effets Stark Electroniques) dans des systèmes modèles ( $C_6H_5-(CH_2)_n-COO^-,M^+$ ) ( $M = Li, Na, K, Rb, Cs$  et  $n = 1-3$ ) en phase gazeuse. L'analyse des Effets Stark Electroniques s'avère être un moyen efficace et incontournable de réaliser les attributions conformationnelles nécessaires à la description de la structure d'ions moléculaires appariés. Dans un deuxième temps, les effets de microsolvatation des paires d'ions sont étudiés par spectroscopie IR en phase gazeuse et permettent d'aborder la problématique de l'organisation supramoléculaire autour d'une paire d'ion. Les connaissances ainsi obtenues sont ensuite appliquées à des solutions électrolytiques ( $[CH_3-COO^-,M^+]$ ;  $M = Li, Na, K, Rb$  et  $Cs$ ) dans le cadre d'une étude théorique poussée, comparée à des mesures spectroscopiques (IR-TF, rayons X) qui permettent d'identifier plusieurs espèces supramoléculaires en solution.

Cette thèse illustre la nécessité de combiner plusieurs approches afin d'obtenir des données complémentaires permettant une meilleure caractérisation de la structure moléculaire et supramoléculaire des ions appariés.

**Formalités d'entrée :**

**Visiteur U.E.** : Se faire connaître au moins 48 heures à l'avance pour l'établissement de votre autorisation d'entrée sur le Centre de Saclay.

**Visiteur hors U.E.** : Se faire connaître au moins 4 jours à l'avance pour les formalités d'entrée et se faire accompagner par un agent CEA.

Sans autorisation, vous ne pourrez entrer sur le Centre de Saclay. Tél. : 33.1.69.08.74 09- Fax : 33.1.69.08.76.39 - email : [caroline.lebe@cea.fr](mailto:caroline.lebe@cea.fr) ou [veronique.gereczy@cea.fr](mailto:veronique.gereczy@cea.fr)

Dans TOUS LES CAS, se munir d'une pièce d'identité (passeport et carte d'identité - pas de permis de conduire)