



LABORATOIRE INTERACTIONS, DYNAMIQUE ET LASERS

LIDyL- UMR9222

# Thèse LIDyL

**HABKA Sana**

**Groupe Structure Biomoléculaire (SBM)**

**Vendredi 15 Septembre 2017 -10h00**

*Amphithéâtre de l'INSTN, CEA Paris-Saclay*

***«Spectroscopie optique des paires d'ions : De la caractérisation des modèles en phase gazeuse à l'identification des paires d'ions en solution»***

Les appariements d'ions sont omniprésents dans la nature, des océans aux aérosols, et passant par les organismes vivants. Les paires d'ions présentes dans les solutions riches en ions y jouent un rôle crucial, notamment dans le déroulement des mécanismes réactionnels chimiques et biochimiques. En dépit de leur importance, la caractérisation expérimentale des paires en solution reste problématique en raison de la coexistence de plusieurs types.

Ainsi, le premier objectif de ce travail est de développer une approche originale en phase gazeuse, pour l'étude des paires d'ions modèles entre un groupement carboxylate et un cation alcalin, illustrant le type d'appariement observé dans le milieu biologique.

Ces premières études sont menées à l'aide d'une approche de spectroscopie IR et UV sélective en conformation, combinée à des calculs au niveau chimie quantique sur des modèles de formule générale  $(C_6H_5-(CH_2)_n-COO^-$ ,  $M^+$ ;  $M = Li, Na, K, Rb, Cs$  et  $n \leq 4$ ). L'appariement entre les ions a été ainsi caractérisé sur l'ensemble de ces systèmes, et une compétition entre les interactions cation-anion et cation- $\pi$  a été observée pour les systèmes de plus grande taille.

Dans un second temps, une étude théorique est développée dans l'objectif de proposer un spectre théorique pour chaque type de paires, et de le confronter aux spectres expérimentaux en solution de la littérature. L'approche repose sur le calcul de la signature vibrationnelle de paires  $(CH_3-COO^-$ ,  $M^+$ ;  $M = Li, Na$ ) et de l'anion libre, entourés successivement de molécules d'eau explicites décrites au niveau chimie quantique, puis au niveau champ de force et enfin par un modèle de solvant continu.

Cet apport original pour l'étude des paires d'ions neutres ouvre la voie vers une meilleure caractérisation de ces paires dans les solutions électrolytiques.

*Vous êtes tous cordialement conviés au pot qui suivra*

