



Soutenance de thèse

Alejandro GUTIERREZ-QUINTANILLA

Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay (ISMO), Orsay

Molécules et complexes à liaison hydrogène : solvation et photoréactivité en matrices cryogéniques

La liaison hydrogène est une interaction stabilisante très importante, qui est présente dans de nombreux systèmes moléculaires, des petits clusters d'eau à la molécule d'ADN. L'étude du cas de la liaison hydrogène intramoléculaire (LHI) est d'un intérêt particulier en raison du rôle important de ce type d'interaction dans les processus de transfert d'hydrogène interne, dans la photodynamique et la conformation structurale. La famille des molécules β -dicarbonyles est un système modèle de LHI unique car il possède relativement peu de degrés de liberté et tous les processus mentionnés précédemment sont clairement présents. L'objectif principal de ce travail de thèse est d'étudier le lien entre structure isotopique et électronique des molécules β -dicarbonyles, force de la liaison hydrogène intramoléculaire, sélectivité sur le processus de photoisomérisation et couplage du transfert d'hydrogène avec d'autres mouvements de grande amplitude.

Quatre molécules de la famille des β -dicétones (acétylacétone doublement deutérée, 3-chloroacétylacétone, hexafluoroacétylacétone et trifluoroacétylacétone) et une β -dialdéhyde (2-chloromalonaldéhyde) sont étudiées dans des environnements inertes à basse température par spectroscopie électronique et vibrationnelle (FT-IR et Raman). Le néon et le para hydrogène ont été utilisés principalement comme matrices hôtes permettant une analyse spectroscopique claire. Les expériences ont été complétées par des calculs de chimie quantique.

Mots clés : liaison hydrogène, acétylacétone, photoisomérisation, matrices cryogéniques, para-hydrogène

Vendredi 16 décembre 2016 à 14h30

Bât 210 – Amphi 1 (2^{ème} étage)

Université Paris-Sud, 91405 Orsay Cedex

La soutenance sera suivie d'un pot auquel vous êtes chaleureusement conviés.