



CYCLE DE CONFÉRENCES DE CHIMIE

*Avec le concours de : Manufacture Française des Pneumatiques MICHELIN
Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Clermont-Ferrand
Institut de Chimie de Clermont-Ferrand (ICCF UMR 6296)
U.F.R.S.T. Département de Chimie*

Jeudi 26 Septembre 2013 à 16h

Amphi de Chimie Paul REMI - (Site des Cézeaux)

Dr. Stéphane Coussan

*Laboratoire de Physiques des Interactions Ioniques et Moléculaires, UMR 7435,
Aix-Marseille Université, Marseille*

Photochimies Infrarouge et UV d'agrégats et de monomères à liaisons hydrogène inter et intramoléculaires. Apports de la théorie dans l'interprétation des résultats expérimentaux

Depuis de nombreuses années le laboratoire s'intéresse aux agrégats et monomères à liaisons hydrogène inter et intramoléculaires. Leur étude est réalisée en matrices cryogéniques par spectroscopies IRTF et UV. Si la technique des matrices est relativement ancienne la possibilité de réaliser des irradiations sélectives IR ou UV, grâce à des lasers continûment accordables, l'est beaucoup moins. Cette approche expérimentale permet d'identifier les différents isomères présents dans le milieu d'étude, notamment ceux instables à température ambiante, mais aussi d'approcher les chemins réactionnels de relaxation vibrationnelle et électronique, impliqués dans des phénomènes de photo-isomérisation. Cet aspect expérimental est indissociable d'un aspect théorique qui a considérablement évolué ces dernières années. Effectivement on est passé de simples calculs de structures et jeux de fréquences harmoniques par méthodes *ab initio* et DFT, à l'exploration plus générale des surfaces de potentiel, par méthodes semi-empiriques suivies de calculs dans le formalisme DFT, et dernièrement, à des tentatives de modélisation des molécules piégées dans les sites des cristaux cryogéniques. Ces études couplées fournissent un outil particulièrement performant d'étude de ces systèmes à liaisons hydrogène et de leur comportement sous irradiation, comme par exemple, la caractérisation du passage par un état triplet lors de la relaxation électronique de la molécule d'acétylacétone (molécule modèle pour les transferts de protons intramoléculaires), état qui avait toujours été postulé théoriquement mais jamais identifié expérimentalement.

