

États excités des molécules protonées

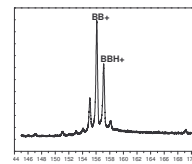
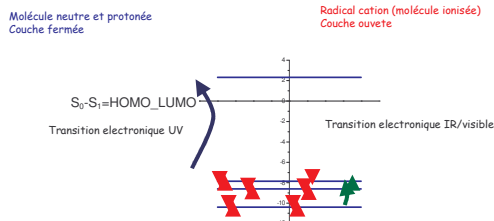
I. Alata, S. Chakraborty, C. Dedonder, M. Broquier, C. Juvet

Centre laser de l'Université Paris Sud, Laboratoire de photophysique moléculaire du CNRS du CNRS (UPR 3361), Cedex, France

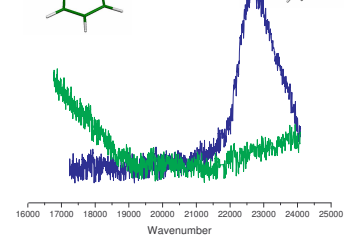
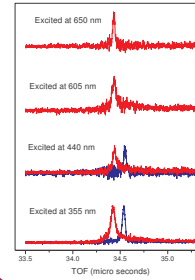
Introduction

Le but de ce travail est de caractériser les propriétés des états électroniques excités des molécules protonées isolées et plus particulièrement les molécules aromatiques. Par caractériser on entend : énergie des transitions électroniques, durée de vie des états excités, dynamique de fragmentations induit par cette excitation. Cette caractérisation se fera en fonction du site de protonation. Aussi surprenant que cela puisse paraître les informations concernant les états électroniques de molécules protonées tel que le benzène n'ont fait l'objet que d'une publication à très très basse résolution. Par exemple on ne sait pas sur une molécules aussi simple que celle la si le premier état excité est stable, pré-dissocié ou dissociatifs (nos calculs semblent montrer qu'ils sont dissociatifs). Pour des molécules telles que le phénol, l'aniline, le xylène, le Naphthalène et autre dérivés benzénique rien n'est connu en phase gazeuse Il s'agit d'un projet de recherche fondamentale, mais il va de soit que la connaissance des propriétés optiques de ces molécules protonées permettra peut être de les détecter dans des endroits ou il est impossible d'installer un spectromètre de masse (nuage interstellaire, ionosphère des planètes, réacteurs à plasma, échappement de combustion)

Les molécules protonées sont iso-électroniques des molécules neutres (état fondamental singulet). Donc les deux espèces devraient avoir une structure électronique voisine donc des propriétés optiques très voisines

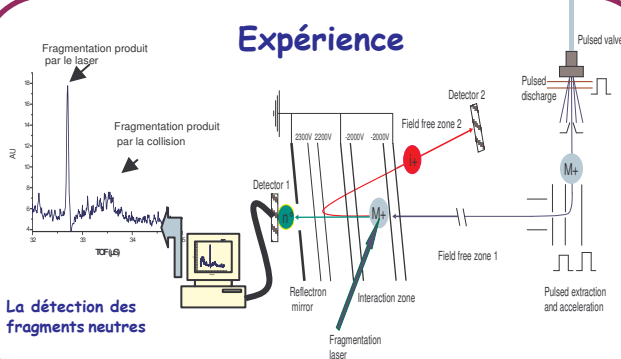


Dimer de benzène protoné



Dimer neutre absorbe à 4.6eV (270nm)
Le dimer protoné dans le visible 2.7eV(450nm)

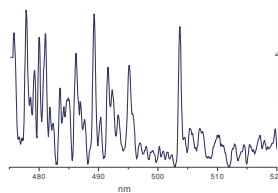
Expérience



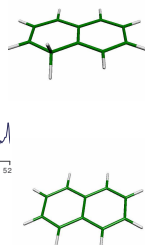
La détection des fragments neutres

Spectre de Photodissociation du NaphthalèneH+

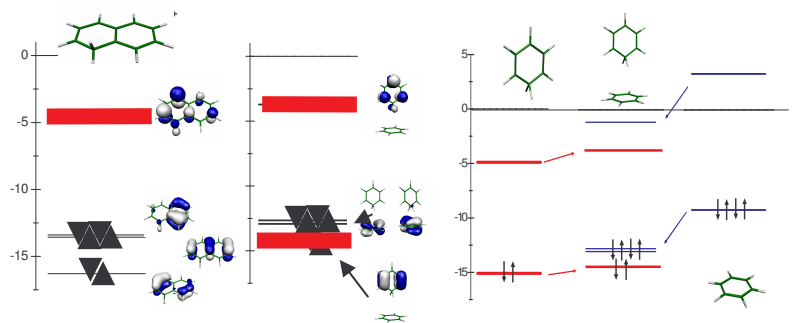
Absorption du Naphthalène protonée dans le visible (504nm 2.5eV)



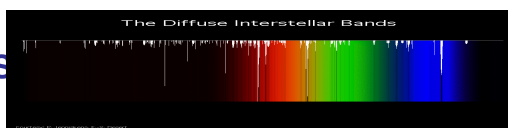
Dans la molécule neutre (3.12nm. 4eV)



La protonation induit la présence d'un état à transfert de charge Dans le dimer de benzène et dans la molécule de Naphthalène



Application possible : Les DIBS



The interstellar chemistry of AH⁺ cations (Snow, Theodore.; Le Page, Valery; Keheyan, Yeghis; Bierbaum, Veronica M. Nature 391(6664), 15 January 1998, 1) ...and we therefore suggest that the resulting protonated PAH cations (and species derived from them) should become the focus of future searches for a correspondence between molecular absorption features and the DIBs)

2) However, small protonated PAH cations are not expected to have visible absorption spectra....

Mais si, mais si les petits PAH⁺ protonés absorbent dans le visible!!!