



**HAL**  
open science

## Étude de molécules d'intérêt biologique solvatées en micro-jet liquide par spectroscopie d'électrons en coïncidences

Marine Fournier, Lucie Huart, Christophe Nicolas, Bastien Lutet-Toti, Francis Penent, Pascal Lablanquie, Loïc Journal, Iyas Ismail, Jean-Philippe Renault, Marie-Anne Hervé Du Penhoat, et al.

### ► To cite this version:

Marine Fournier, Lucie Huart, Christophe Nicolas, Bastien Lutet-Toti, Francis Penent, et al.. Étude de molécules d'intérêt biologique solvatées en micro-jet liquide par spectroscopie d'électrons en coïncidences. JNSPE 2022 - Journées Nationales des Spectroscopies de Photoémission, May 2022, Dijon, France. hal-03872066

**HAL Id: hal-03872066**

**<https://hal.science/hal-03872066>**

Submitted on 25 Nov 2022

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Distributed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

## Etude de molécules d'intérêt biologique solvatées en micro-jet liquide par spectroscopie d'électrons en coïncidences

**Marine Fournier<sup>a</sup>, Lucie Huart<sup>b</sup>, Christophe Nicolas<sup>b</sup>, Bastien Lutet-Toti<sup>a</sup>, Francis Penent<sup>a</sup>, Pascal Lablanquie<sup>a</sup>, Loïc Journal<sup>a</sup>, Iyas Ismail<sup>a</sup>, Jean-Philippe Renault<sup>c</sup>, Marie-Anne Hervé du Penhoat<sup>d</sup> et Jérôme Palaudoux<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> LCPMR, Sorbonne Université - UPMC, UMR CNRS 7614, Paris, France

<sup>b</sup> Synchrotron SOLEIL, Saint Aubin, France

<sup>c</sup> NIMBE UMR CEA-CNRS 3685, Saclay, France,

<sup>d</sup> IMPMC, Sorbonne-Université – UPMC, UMR CNRS 7590, Paris, France

\*Contact: [marine.fournier@sorbonne-universite.fr](mailto:marine.fournier@sorbonne-universite.fr)

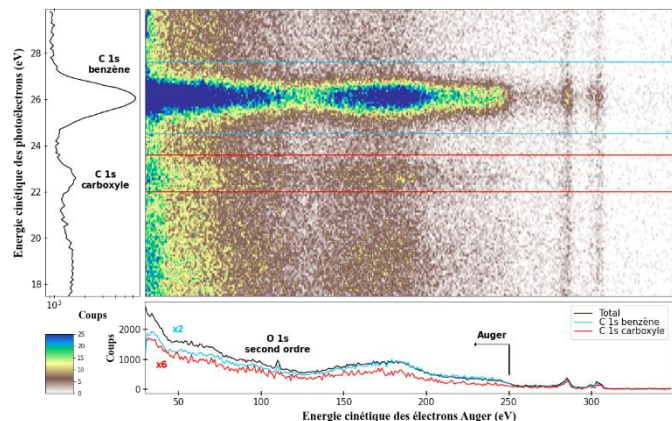
### Résumé :

La spectroscopie de photoélectrons est une technique puissante qui permet d'étudier les voies de relaxation d'une molécule ionisée après exposition au rayonnement électromagnétique (synchrotron). L'ionisation en couche interne, après l'éjection d'un photoélectron, est souvent suivie d'un déclin Auger ( $h\nu + M \rightarrow M^{+*} + e_{ph}^- \rightarrow M^{++} + e_{ph}^- + e_{A}^-$ ). Ici, nous avons utilisé une méthode de spectroscopie en coïncidences entre photoélectrons et électrons Auger qui permet un filtrage efficace des différents processus en jeu. Elle utilise un spectromètre d'électrons de type bouteille magnétique<sup>1</sup>, largement utilisée pour l'analyse d'atomes et de molécules en phase gaz<sup>2</sup>, mais dont l'application à des molécules solvatées en phase liquide est encore en plein développement<sup>3</sup>.

A cet effet, notre équipe a conçu un spectromètre qui couple une bouteille magnétique à un micro-jet liquide sous ultraviolette<sup>1,4</sup>. La présence d'une contribution notable de l'eau en phase gaz autour du jet liquide rend l'obtention et l'analyse des spectres complexe. Des études ont été menées sur le benzoate de sodium ( $C_5H_5NaCOO^-$ ) et sur des molécules dérivées avec ce nouveau spectromètre sur la ligne de lumière PLEIADES du synchrotron SOLEIL. Les seuils 1s de l'oxygène et du carbone ont été explorés. La **Figure 1** représente la cartographie 2D, en énergie cinétique, des coïncidences entre les photoélectrons C 1s éjectés de cette molécule (en ordonnée) et les électrons Auger correspondants (en abscisse). Des îlots de coïncidences sont bien visibles.

Le spectre de photoélectrons est indiqué sur la gauche de la figure. Nous y observons deux pics distincts de photoélectrons issus des six carbones du groupement benzène et du carbone du groupement carboxyle.

La projection des données sur l'axe des abscisses (sous la cartographie) nous donne accès aux spectres Auger. Le spectre Auger total (non filtré) est renseigné en noir. Les spectres filtrés en énergie ont été obtenus après sélection de deux bandes représentées par des encadrés bleu et rouge, qui correspondent donc aux spectres Auger consécutifs à l'ionisation sélective des carbones dans leurs deux environnements. Ce filtrage, couplé avec des calculs de chimie quantique, permettra de déterminer et de comparer les états finaux peuplés des molécules analysées en fonction de l'atome initialement ionisé. Des mesures similaires ont été réalisées sur les molécules d'hydroxy-benzoate et d'acide benzoïque.



**Figure 1.** Cartographie à deux dimensions en énergie des coïncidences électrons-électrons. Spectres en énergie des photoélectrons et des électrons Auger

Suite à ces résultats probants, des mesures ont également été réalisées sur une molécule d'intérêt biologique, l'urée ( $CH_4N_2O$ ) aux seuils du C 1s, O 1s et N 1s et les résultats correspondant seront également présentés.

### Références



1. F. Penent *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **2005**, *95*, 083002
2. H. Iwayama *et al.*, *J. Chem. Phys.* **2013**, *138*, 024306
3. M. N. Pohl *et al.*, *J. Phys. Chem.* **2017**, *121*, 32, 7709–7714
4. C. Nicolas *et al.* submitted