



HAL
open science

Etude de la modification structurale des porphyrines et son impact sur les spectres d'absorption et d'émission UV Visible.

Léo Cantarell, Camille Philippon

► **To cite this version:**

Léo Cantarell, Camille Philippon. Etude de la modification structurale des porphyrines et son impact sur les spectres d'absorption et d'émission UV Visible.. Demi-journée de restitution. Initiation à la démarche scientifique 2022-2023 ENS PARIS SACLAY, Jan 2023, GIF SUR YVETTE, France. 10.5281/zenodo.7515243 . hal-03930502

HAL Id: hal-03930502

<https://hal.science/hal-03930502v1>

Submitted on 9 Jan 2023

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 - NonCommercial - NoDerivatives 4.0 International License

La structure moléculaire des porphyrines peut-elle influencer sur les propriétés d'absorption et d'émission ?

CANTARELL Léo LDD3FJCPC

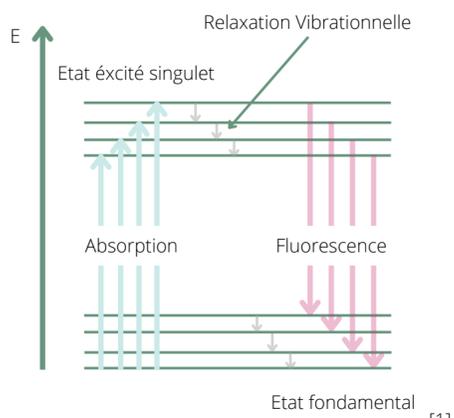
PHILIPPON Camille LLD3FJCPC

I Absorption et fluorescence

Intéressons-nous ici à l'absorbance et la fluorescence. Nous allons nous concentrer sur ces deux phénomènes et à l'impact de la différence de structure des porphyrines sur ceux-ci.

Mots Clés

Bande de Soret Bande Q Loi de Kasha



Protoporphyrine des œufs Rouge sous UV (365nm)

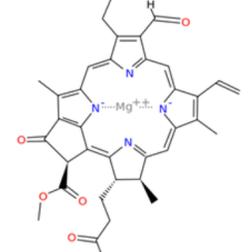
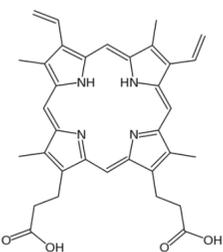
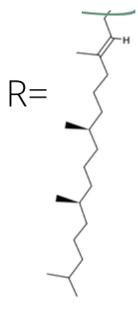
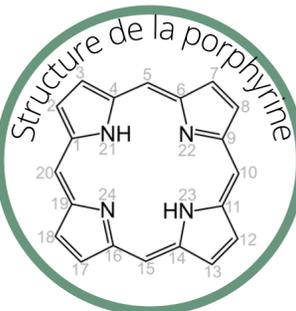
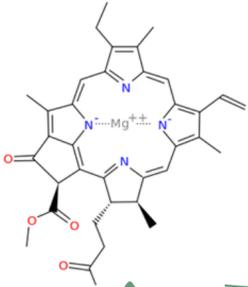
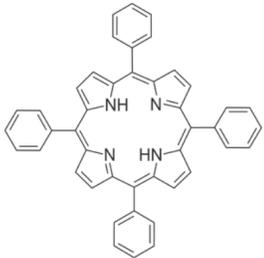
De gauche à droite
Herbe, Spiruline verte,
Tétraphénylporphyrine, œuf
dans l'éthanol sous UV (365nm)



II Analyse structurale

Tétraphénylporphyrine (TPP)

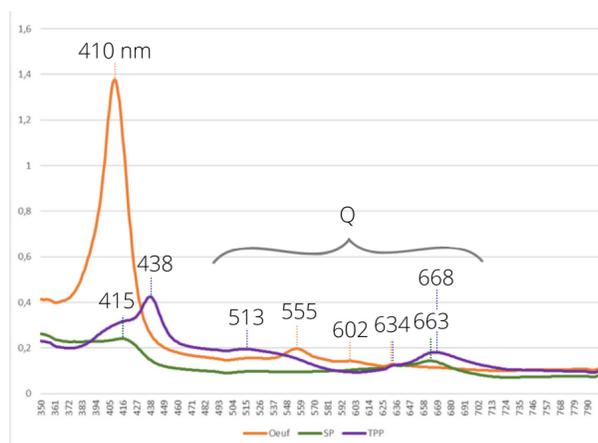
Chlorophylle A



Protoporphyrine

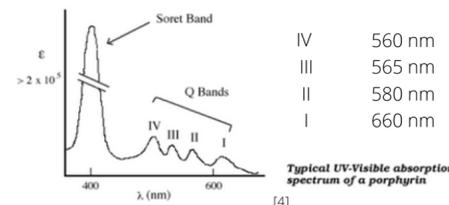
Chlorophylle B

• Absorbance en solution (éthanol)



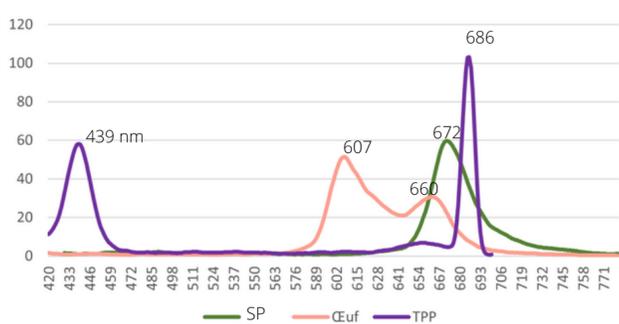
Bandes Q → Nombreuses
Intensité faible
Difficilement explicables.

Bande de Soret → Unique
Intensité élevée
Facilement explicables.

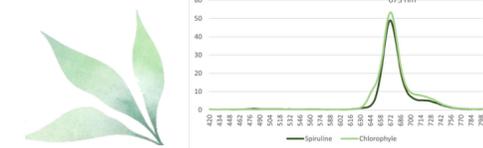


	Soret	Q1	Emission
Oeuf	410	634	660
Chlorophylle	415	664	672
TPP	438	668	686

• Emission en solution acide 640 nm - 700 nm



Emission dans l'éthanol



On en déduit de cette étude que la spiruline contient de la chlorophylle.

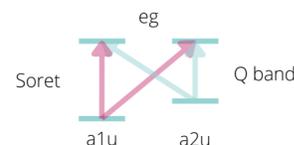
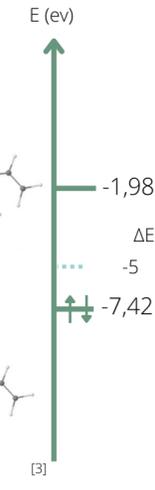
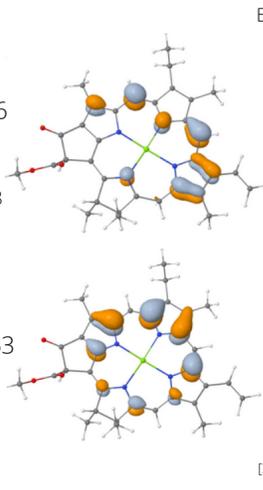
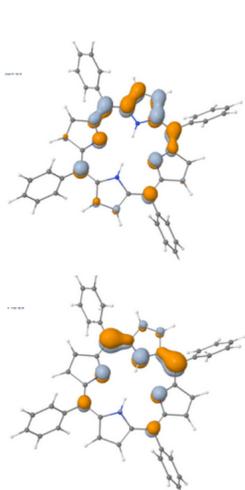
Bande à 664 nm
↓
La chlorophylle étudiée correspond à la chlorophylle A (cf QR code)

III Analyse orbitale HO/BV

Tétraphénylporphyrine

Chlorophylle A

Porphyrine



Observations

D'après la relation de Planck-Einstein : $\Delta E = hc / \lambda$
On peut déduire qu'une augmentation de $\Delta E(\text{HO-BV})$ implique une diminution de la longueur d'onde des structures avec groupements. Ici la complexation par un métal de la TPP n'est pas prise en compte. En la comptant on obtient $\Delta E \text{ Final} = 2,82$. [7] De plus d'après une étude de 2014 sur les structures porphyriniques on observe que la différence HO BV n'est pas à -7/-2 mais -5/-2eV [8][9]. On obtient ainsi un nouvel écart appelé $\Delta E \text{ Final}$

	$\Delta E \text{ Orbitale}$	$\Delta E \text{ Final}$	$\lambda \text{ relatif à } \Delta E$	Déplacement λ
Porphyrine	$\Delta E = 5,4 \text{ eV}$	$\Delta E = 3,1 \text{ eV}$	400,16	Aucun
Chlorophylle	$\Delta E = 5,44 \text{ eV}$	$\Delta E = 3,02 \text{ eV}$	410,76	Léger vers infra
TPP	$\Delta E = 6,17 \text{ eV}$	$\Delta E = 2,82 \text{ eV}$	439,89	fort vers infra

Bibliographie

- [1] : <https://www.lchimie.fr/analytique/fluorimetrie/> (consulté le 07/11/2022)
- [2] : Dataset on the absorption characteristics of extracted phytoplankton pigments ; Lesley A. Clementson, Bozena Wojtasiewicz
- [3] : <https://www.lct.jussieu.fr/pagesperso/orbimol/fr/index-fr.shtml>
- [4] : Absorption and Fluorescence Spectroscopy of Tetraphenylporphyrin and Metallo-Tetraphenylporphyrin Prushan, 2005
- [5] : <https://new.societechimiquedefrance.fr/wp-content/uploads/2019/12/piard-annexe-presentations.pdf>
- [6] : Porphyrin UV-Vis Submitted by Matthew Riehl / Minnesota State University, Mankato
- [7] Synthesis and electronic properties of A3B-thienyl porphyrins: Experimental and computational investigations
- [8] Theoretical investigation of the charge-transfer properties in different meso-linked zinc porphyrins for highly efficient dye-sensitized solar cells
- [9] Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer, Tian Lu,Feiwu Chen

Conclusion

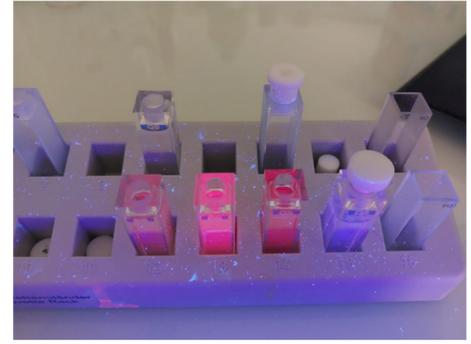
En conclusion de cette étude, l'ajout de groupements tendant à favoriser la liaison métal ligand par donation direct (mésomerie) ou indirecte (induction) modifie le déplacements des bandes de Soret (découle de la modification des orbitales HO BV) de quelques nanomètres vers l'infrarouge, impactant ainsi les propriétés UV Visibles.
Une analyse structurale permet de retrouver un ordre de grandeur de ces valeurs de longueurs d'onde pour la bande de Soret.



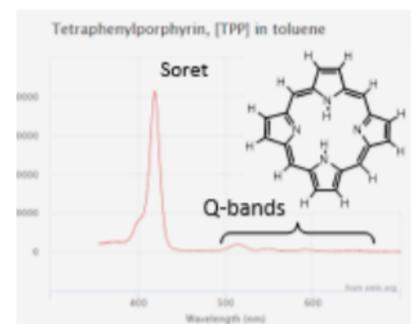
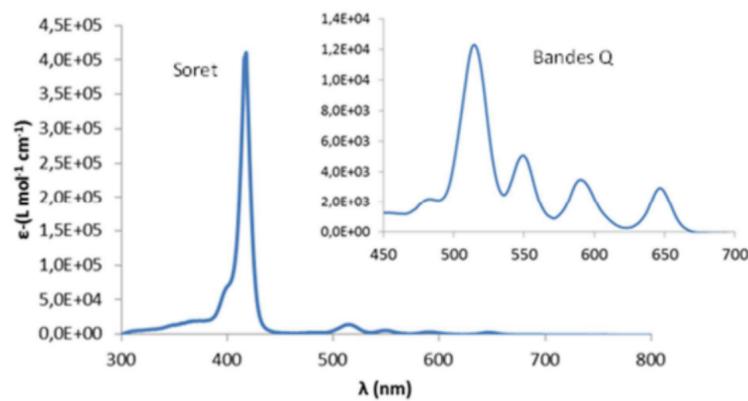
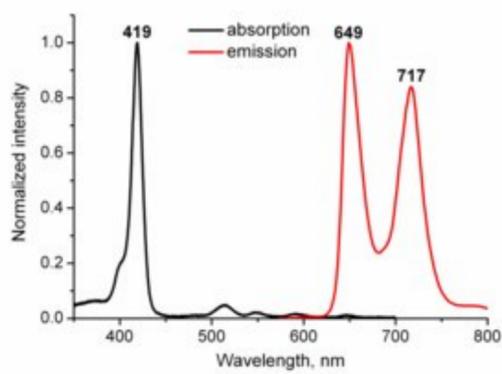
SCAN ME



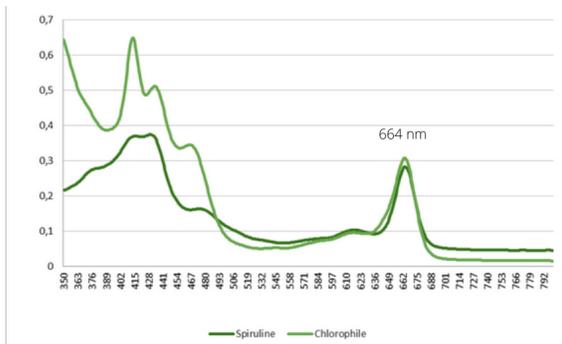
Qr Code



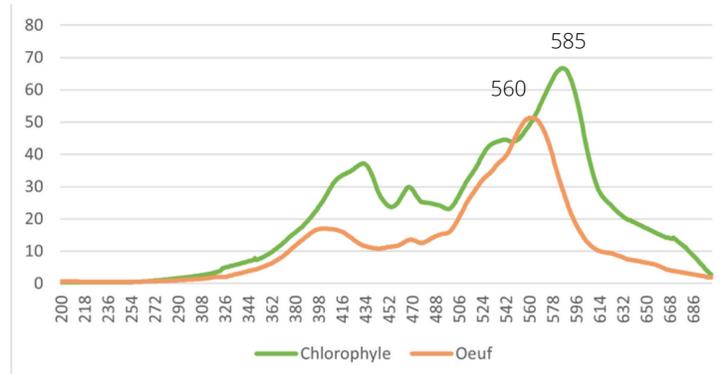
Bande référence de la TPP



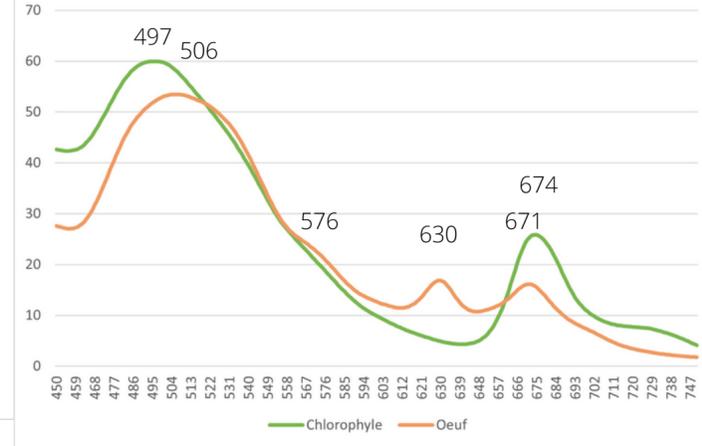
Absorption dans l'éthanol



Emission dans l'éthanol



Emission sous forme solide



Valeurs des orbitales de la TPP avec plusieurs types de métaux complexés

