



**HAL**  
open science

# Effet du mouvement de puckering et de la formation de liaison hydrogène sur le spectre de dichroïsme circulaire vibrationnel d'une molécule flexible: le 1-Indanol

Katia Le Barbu-Debus, Arne Scherrer, Aude Bouchet, Daniel Sebastiani,  
Rodolphe Vuilleumier, Anne Zehnacker

## ► To cite this version:

Katia Le Barbu-Debus, Arne Scherrer, Aude Bouchet, Daniel Sebastiani, Rodolphe Vuilleumier, et al.. Effet du mouvement de puckering et de la formation de liaison hydrogène sur le spectre de dichroïsme circulaire vibrationnel d'une molécule flexible: le 1-Indanol. GDR EMIE 2018, Nov 2018, Nouan-le-Fuzelier, France. hal-04327873

**HAL Id: hal-04327873**

**<https://hal.science/hal-04327873>**

Submitted on 6 Dec 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

# Effet du mouvement de puckering et de la formation de liaison hydrogène sur le spectre de dichroïsme circulaire vibrationnel d'une molécule flexible : le 1-Indanol

Katia Le Barbu-Debus<sup>1</sup>, Arne Scherrer<sup>2,3</sup>, Aude Bouchet<sup>1</sup>, Daniel Sebastiani<sup>3</sup>, Rodolphe Vuilleumier<sup>2</sup> and Anne Zehnacker<sup>1</sup>

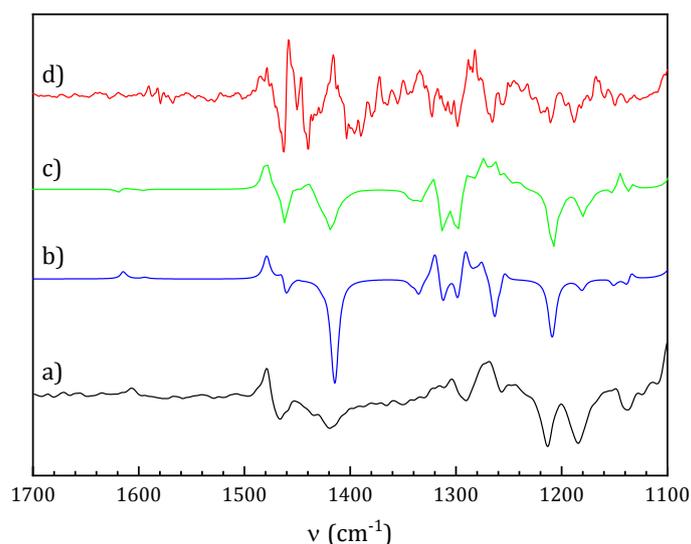
<sup>1</sup>Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay (ISMO), CNRS, Univ. Paris-Sud, Université Paris-Saclay, F-91405 Orsay, France

<sup>2</sup>PASTEUR, Département de chimie, Ecole normale supérieure, PSL University, Sorbonne Université, CNRS, 75005 Paris, France

<sup>3</sup>Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Institut für Chemie, von-Danckelmann-Platz 4, 06120 Halle, Germany

L'influence de la flexibilité et de la formation de liaison hydrogène sur les spectres IR et VCD (Dichroïsme Circulaire Vibrationnel) a été étudiée pour une molécule flexible : le 1-Indanol ; dans un solvant apolaire (CCl<sub>4</sub>) et dans un solvant polaire aprotique (DMSO)<sup>[1]</sup>.

Les spectres expérimentaux, IR et VCD, obtenus par spectroscopie à transformée de Fourier sont comparés à la fois à des calculs statiques grâce à la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et des calculs reposant sur la dynamique moléculaire premiers principes (FPMD), dans le cadre de la DFT, en utilisant la théorie de la perturbation des vitesses des noyaux (NVPT). Dans le chloroforme, solvant pour lequel aucune liaison intermoléculaire ne se forme, le solvant est considéré de façon implicite. Les calculs statiques ne reproduisent pas parfaitement le spectre et l'amélioration apportée par les calculs FPMD est de rendre compte des effets d'anharmonicité et de température. En revanche, dans le cas du DMSO, les trajectoires FPMD ont mis en évidence la formation d'une liaison hydrogène intermoléculaire à longue durée de vie entre le 1-indanol et une molécule de DMSO. C'est pourquoi des calculs statiques de type « cluster in the bulk » reposant sur des complexes 1 : 1 entre le 1-indanol et une molécule de DMSO sont très satisfaisants. Ils peuvent être améliorés en prenant en compte les conformères de plus hautes énergies obtenus lors de la génération des trajectoires de dynamique moléculaire.



**Figure 1** a) Spectre VCD expérimental du (S)-1-indanol dans le DMSO. Spectre VCD simulés obtenus par b) la moyenne pondérée des spectres VCD de complexes (S)-1-indanol/DMSO les plus stables dans un continuum de DMSO calculés au niveau B3LYP/6-31G++(d, p) c) la moyenne des 124 conformères extraits de la trajectoire NVT MD réoptimisés en B3LYP/6-31G++(d, p) d) d'après les analyses NVPT moyennées de deux trajectoires NVE

