



**HAL**  
open science

## Spectroscopie du 4(5)-méthylimidazole et de ses hydrates, hébergés en gouttelette d'hélium

F Grollau, J.-M Mestdagh, B Soep, E Gloaguen, V Brenner, L Poisson, M Mons, M. Briant

► **To cite this version:**

F Grollau, J.-M Mestdagh, B Soep, E Gloaguen, V Brenner, et al.. Spectroscopie du 4(5)-méthylimidazole et de ses hydrates, hébergés en gouttelette d'hélium. Journées annuelles du GdR Edifices Moléculaires Isolés, Jun 2022, Dunkerque, France. cea-03698024

**HAL Id: cea-03698024**

**<https://hal-cea.archives-ouvertes.fr/cea-03698024>**

Submitted on 17 Jun 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.

# Spectroscopie du 4(5)-méthylimidazole et de ses hydrates, hébergés en gouttelette d'hélium

F. Grollau<sup>1</sup>, J.-M. Mestdagh<sup>1</sup>, B. Soep<sup>2</sup>, E. Gloaguen<sup>1</sup>, V. Brenner<sup>1</sup>, L. Poisson<sup>2</sup>, M. Mons<sup>1</sup> et M. Briant<sup>3\*</sup>

<sup>1</sup> Univ. Paris-Saclay, CEA, CNRS, LIDYL, 91191 Gif-sur-Yvette, France

<sup>2</sup> Univ. Paris-Saclay, CNRS, ISMO, 91405, Orsay, France

<sup>3</sup> Univ. Paris-Saclay, CEA, CNRS, NIMBE, 91191 Gif-sur-Yvette, France

L'histidine est l'un des deux acides aminés qui présente un équilibre tautomérique. Cette molécule est par ailleurs, à la fois accepteur et donneur de proton, ce qui lui donne un rôle essentiel dans les processus biologiques où le transfert d'un proton intervient (ex. régulation du pH sanguin). Des études antérieures ont montré que l'équilibre tautomérique de cet acide aminé est modifié par son environnement<sup>[1]</sup>, ce qui rend ses propriétés intrinsèques délicates à obtenir expérimentalement. Connaître ces propriétés est pourtant important pour comprendre le comportement de cet acide aminé lorsqu'il est environné. Les caractéristiques mentionnées ci-dessus sont uniquement portées par le cycle imidazole qui est la chaîne latérale de l'histidine. Ainsi, nous sommes intéressés à une molécule modèle de l'histidine, le 4(5)-méthylimidazole (Melm) (Figure 1).

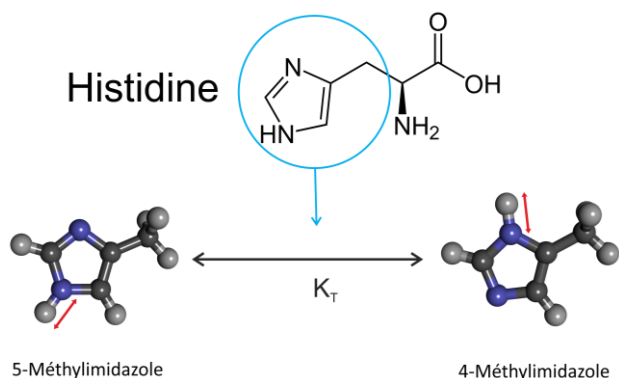


Figure 1: L'histidine et sa molécule modèle, le méthylimidazole.

Sur le plan expérimental, nous avons caractérisé les isomères du Melm et ses hydrates, par spectroscopie infrarouge (IR). Le dispositif Gouttelium<sup>[2]</sup> a permis d'enregistrer les spectres IR de ces espèces en utilisant la technique "Helium NanoDroplet Isolation"<sup>[3]</sup>. Les gouttelettes d'hélium sont des systèmes quantiques froids (0,37 K<sup>[4]</sup>), superfluides<sup>[5]</sup> et très fragiles. Elles thermalisent les espèces qui y sont hébergées et interagissent peu avec ces dernières, ce qui permet d'obtenir des spectres d'absorption IR proche de ceux attendus sur des molécules totalement isolées. Néanmoins, cette observation

porte essentiellement sur la structure vibrationnelle des spectres car la structure rotationnelle est affectée par la présence de la gouttelette.

Nous avons caractérisé sans ambiguïté les deux tautomères du Melm via l'élongation NH dont la fréquence est très sensible à la position du groupe méthyle. L'attribution des bandes IR observées à un conformère spécifique a été faite par comparaison avec des calculs de DFT-D. Les intensités relatives entre bandes nous ont permis d'estimer la constante de tautomérisation,  $K_{5 \leftrightarrow 4}(T=43^\circ\text{C}) = 5,3 \pm 0,8$ , qui n'était pas connue avec précision. Les constantes de rotation du 4-méthylimidazole dans les gouttelettes ont été déterminées grâce à une simulation du spectre et montrent une interaction forte de la rotation avec la gouttelette d'hélium. Ce résultat est attendu car la molécule entraîne une couche d'hélium non superfluide dans sa rotation.

Enfin, les complexes 4(5)-Melm-eau ont été formés par le dépôt des deux espèces dans les gouttelettes d'hélium. Une recherche du signal de l'élongation NH du Melm et de l'élongation symétrique et antisymétrique OH de l'eau a été effectuée.

Les différents spectres et leur interprétation seront présentés, ainsi qu'une discussion.

1. J. A. Vila, *et al.*, *PNAS* **108**, 5602 (2011). <http://dx.doi.org/10.1073/pnas.1102373108>

2. M. Briant, *et al.*, *PCCP* **18**, 16414 (2016). <http://dx.doi.org/10.1039/c6cp02989b>.

3. F. Stienkemeier, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3592 (1995). <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.74.3592>

4. M. Hartmann, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1566 (1995). <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.75.1566>

5. M. Hartmann, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4560 (1996). <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.76.4560>