



**HAL**  
open science

## Etude 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, Ajith Kumar, Francis Penent, Pascal Lablanquie, Loïc Journal, Iyas Ismail, Jean Philippe Renault, et al.

### ► To cite this version:

Marine Fournier, Lucie Huart, Christophe Nicolas, Bastien Lutet-Toti, Ajith Kumar, et al.. Etude de molécules d'intérêt biologique solvatées en micro-jet liquide par spectroscopie d'électrons en coïncidences. Journées Nationales des Spectroscopies de Photoémission, May 2022, Dijon, France. hal-03941641

**HAL Id: hal-03941641**

**<https://hal.sorbonne-universite.fr/hal-03941641v1>**

Submitted on 16 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.

# ETUDE DE MOLÉCULES D'INTÉRÊT BIOLOGIQUE SOLVATÉES EN MICRO-JET LIQUIDE PAR SPECTROSCOPIE D'ÉLECTRONS EN COÏNCIDENCES

M. Fournier<sup>a</sup>, L. Huart<sup>b,c</sup>, C. Nicolas<sup>b</sup>, B. Lutet-Toti<sup>a</sup>, A. Kumar<sup>b</sup>, F. Penent<sup>a</sup>, P. Lablanquie<sup>a</sup>, L. Journal<sup>a</sup>, I. Ismail<sup>a</sup>, J-P. Renault<sup>c</sup>, M-A Hervé du Penhoat<sup>d</sup> et J. Palaudoux<sup>a</sup>



<sup>a</sup> LCP-MR, Sorbonne Université, UMR 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, UMR 7590, Paris, France



ANR-17-CE30-0017

## Contexte

Dans ce travail, on s'intéresse à la spectroscopie d'électrons Auger qui est une méthode puissante pour l'étude des voies de relaxation qui font suite à l'ionisation en couche interne d'un atome ou d'une molécule. La **Figure 1** décrit succinctement les étapes de ce processus.

Pour aller au-delà de la spectroscopie Auger classique, la spectroscopie Auger en coïncidences avec les photoélectrons permet de distinguer chacune des voies de désexcitation mises en jeu. Largement utilisée pour des études d'atomes [1] ou des molécules en phase gaz [2] par exemple, son application pour des molécules solvatées en phase liquide est en plein développement [3]. Un spectromètre d'électron de type bouteille magnétique, couplé à un micro-jet liquide a été conçu à cet effet par notre équipe [4]. Son fonctionnement est décrit dans la partie expérimentale.

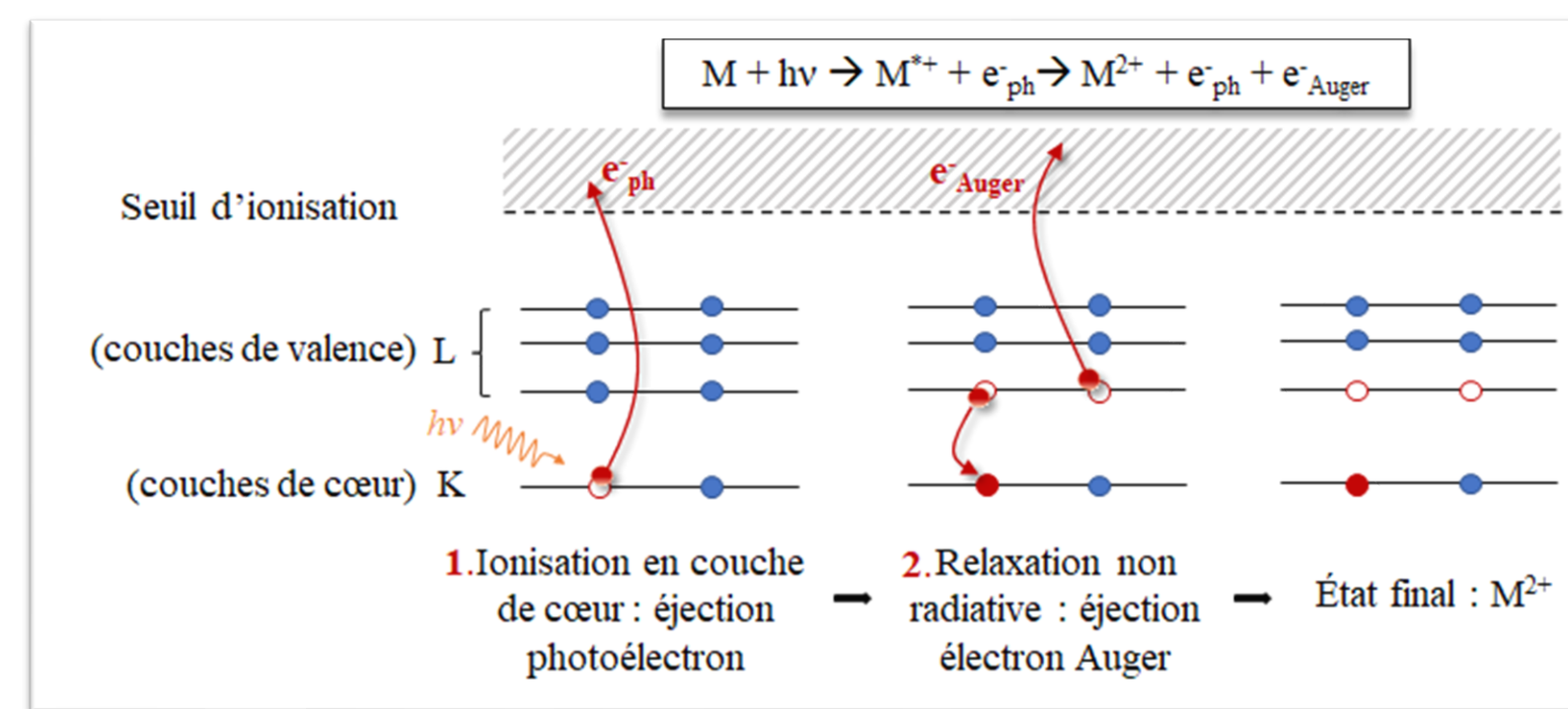
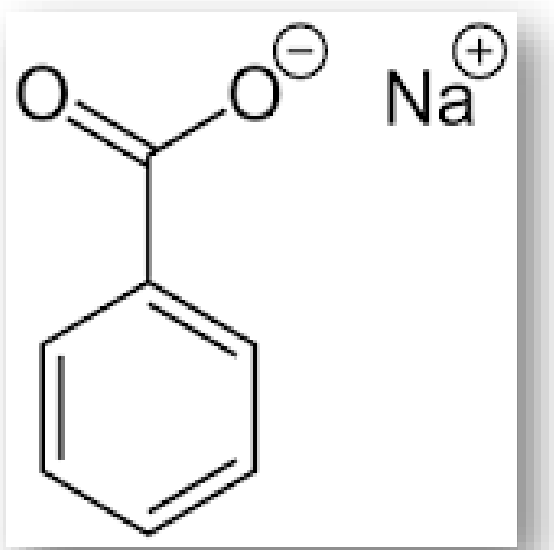


Figure 1 : Schéma simplifié du processus Auger

Des mesures sur le benzoate de sodium (structure ci-contre), et sur des molécules apparentées ont été effectuées à l'aide de ce spectromètre sur la ligne PLEIADES du synchrotron SOLEIL. Pour ces systèmes moléculaires les processus de relaxation Auger ont été sondés au dessus des seuils d'ionisation 1s de l'oxygène et du carbone.



Pour séparer les différentes contributions venant des oxygènes de l'eau (phase liquide ou gazeuse) de celle du benzoate de sodium et ainsi pouvoir différencier les états électroniques finaux peuplés, les spectres en énergie cinétique ont été filtrés.

## Partie expérimentale

Le principe de la bouteille magnétique [5,6] et un zoom sur la région d'interaction est schématisé en haut de la **Figure 2**. Nous pouvons résumer les étapes de fonctionnement de la manière suivante :

- 1 Ionisation des molécules dans le jet liquide (d=40µm) en interaction avec le faisceau de lumière synchrotron
- 2 Collecte sur 4π (miroir magnétique) des électrons éjectés grâce au champ fort et inhomogène (0,7 T) d'un aimant permanent qui peut être déplacé dans les trois directions de l'espace (pour alignement)
- 3 Parallélisation des trajectoires des électrons entre la zone de champ magnétique fort et inhomogène de l'aimant et de champ faible et homogène du solénoïde (1 mT) qui guide les électrons jusqu'au détecteur
- 4 Enregistrement du temps de vol des électrons puis conversion en énergie cinétique

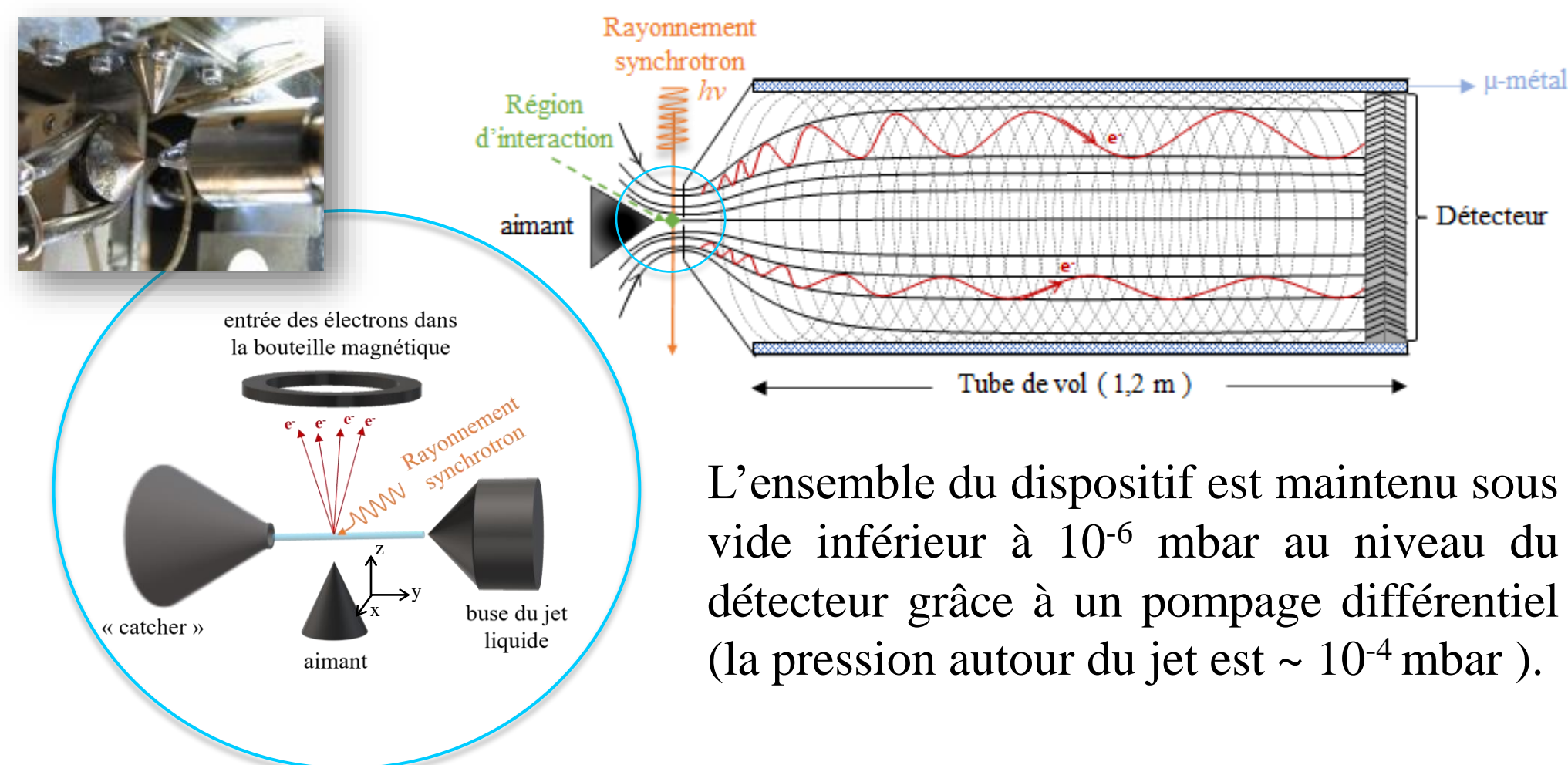


Figure 2 : Schéma du fonctionnement de la bouteille magnétique (en haut) et ensemble micro-jet liquide - aimant (à gauche)

## Benzoate de sodium

Le traitement des données a été effectué avec le logiciel Python.

On se concentre dans un premier temps sur l'ionisation d'électron 1s de l'oxygène de l'eau et du benzoate de sodium, avec une énergie de photon :  $h\nu = 580 \text{ eV}$ . Les électrons ont été **décélérés de 20 V** (afin d'améliorer la résolution).

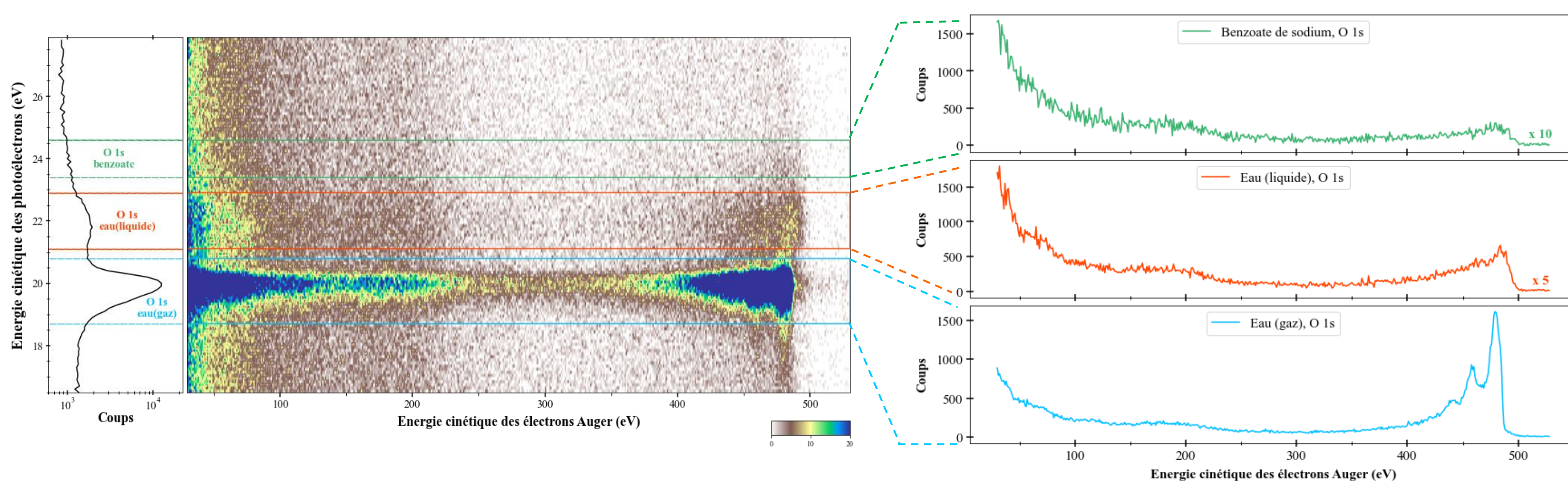


Figure 3 : Cartographie 2D des coïncidences électrons Auger - photoélectrons au dessus du seuil 1s de l'oxygène (à gauche), spectres Auger filtrés (liquide, gaz) en énergie cinétique (à droite)

- Présence d'ilots de coïncidences entre les photoélectrons et les électrons Auger sur la **Figure 3** et la **Figure 4** (panneau de gauche).
- Projection sur l'axe x (énergie cinétique des électrons Auger) : filtrage en énergie (sommation des événements dans une zone de couleur définie) des spectres des électrons Auger (panneau de droite).
- Distinction des pics des photoélectrons qui proviennent de l'eau en phase gazeuse, en phase liquide et du benzoate de sodium sur la **Figure 3**.

On se concentre maintenant sur l'ionisation d'électron 1s des carbones du benzoate de sodium, avec une énergie de photon :  $h\nu = 335 \text{ eV}$ . Les électrons ont été **décélérés de 20 V**.

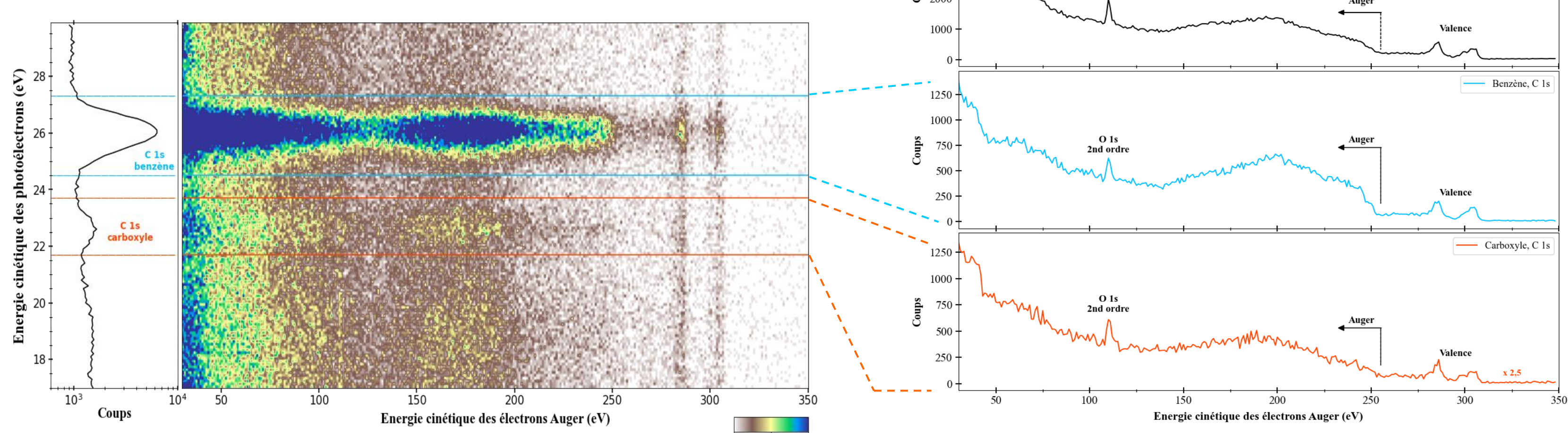


Figure 4 : Cartographie 2D des coïncidences électrons Auger - photoélectrons au dessus du seuil 1s du carbone et projection du spectre total des photoélectrons (à gauche), spectre total (en haut à droite) et spectres Auger (benzène/carboxyle) filtrés en énergie (à droite)

- Distinction des photoélectrons qui proviennent des carbones du groupement benzène et du carbone du groupement carboxyle sur la **Figure 4**.
- Comportement de relaxation électronique différent dans la zone des électrons Auger entre les deux environnements chimiques (benzène/carboxyle) **pour une même molécule** pour les mesures au seuil du C 1s.

## Conclusions et perspectives

- ✓ A l'aide d'un spectromètre d'électrons de type bouteille magnétique, il a été possible d'observer des coïncidences entre les photoélectrons et les électrons Auger pour des molécules solvatées dans un environnement micro-jet liquide.
- ✓ Les spectres des électrons Auger ont été filtrés en fonction de l'atome ionisé à chaque seuil 1s (oxygène ou carbone) et de son environnement chimique.
- ✓ Les contributions de la relaxation électronique de l'eau en phase gazeuse et liquide, après une ionisation en couche interne, ont pu être séparées grâce aux mesures en coïncidences.
- ✓ Pour des molécules presque identiques, des différences dans les spectres Auger ont pu être identifiées pour un même environnement chimique (benzène ou carboxyle). Des différences sont également observables pour une même molécule entre les deux sites d'ionisation (cycle/carboxyle). Des calculs théoriques permettront d'identifier les états peuplés.
- ✓ Ce traitement sera appliqué pour des molécules d'intérêt biologique telles que l'urée, pour laquelle il a été également possible de sonder la relaxation électronique après une ionisation 1s de l'azote.

## Molécules apparentées

Le même traitement a été effectué pour l'**acide benzoïque** et le **2-hydroxy-benzoate** au dessus du seuil 1s du carbone ( $h\nu = 335 \text{ eV}$ , les électrons ont été **décélérés de 20 V**). Les spectres totaux des photoélectrons de chaque molécule étudiée sont représentés **Figure 5**.

→ Décalage en énergie des pics de photoélectrons

Les spectres totaux et filtrés des électrons Auger de chacune des molécules sont donnés respectivement dans les **Figure 6** et **7**.

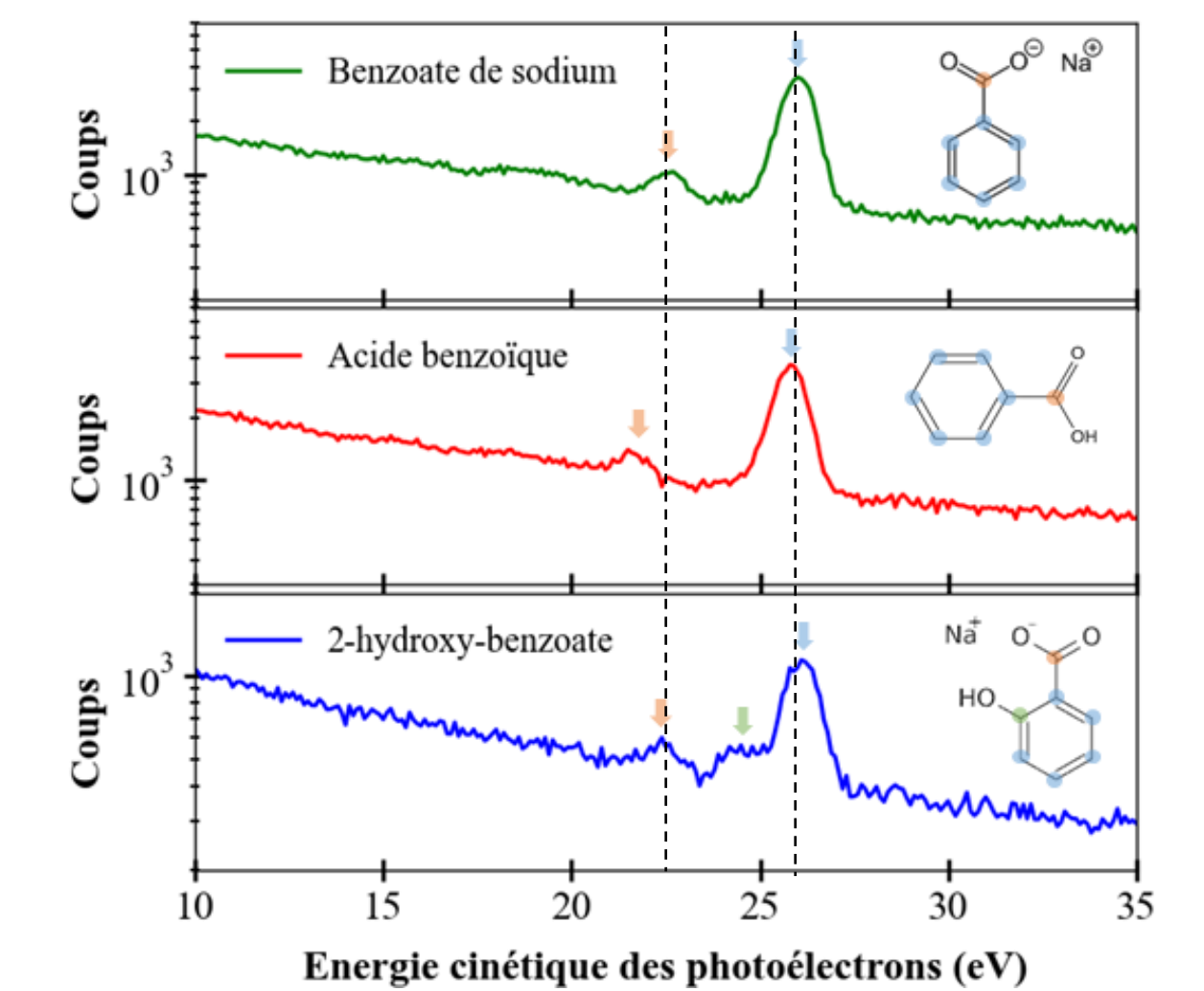


Figure 5 : Spectres des photoélectrons du benzoate de sodium, de l'acide benzoïque et du 2-hydroxy benzoate

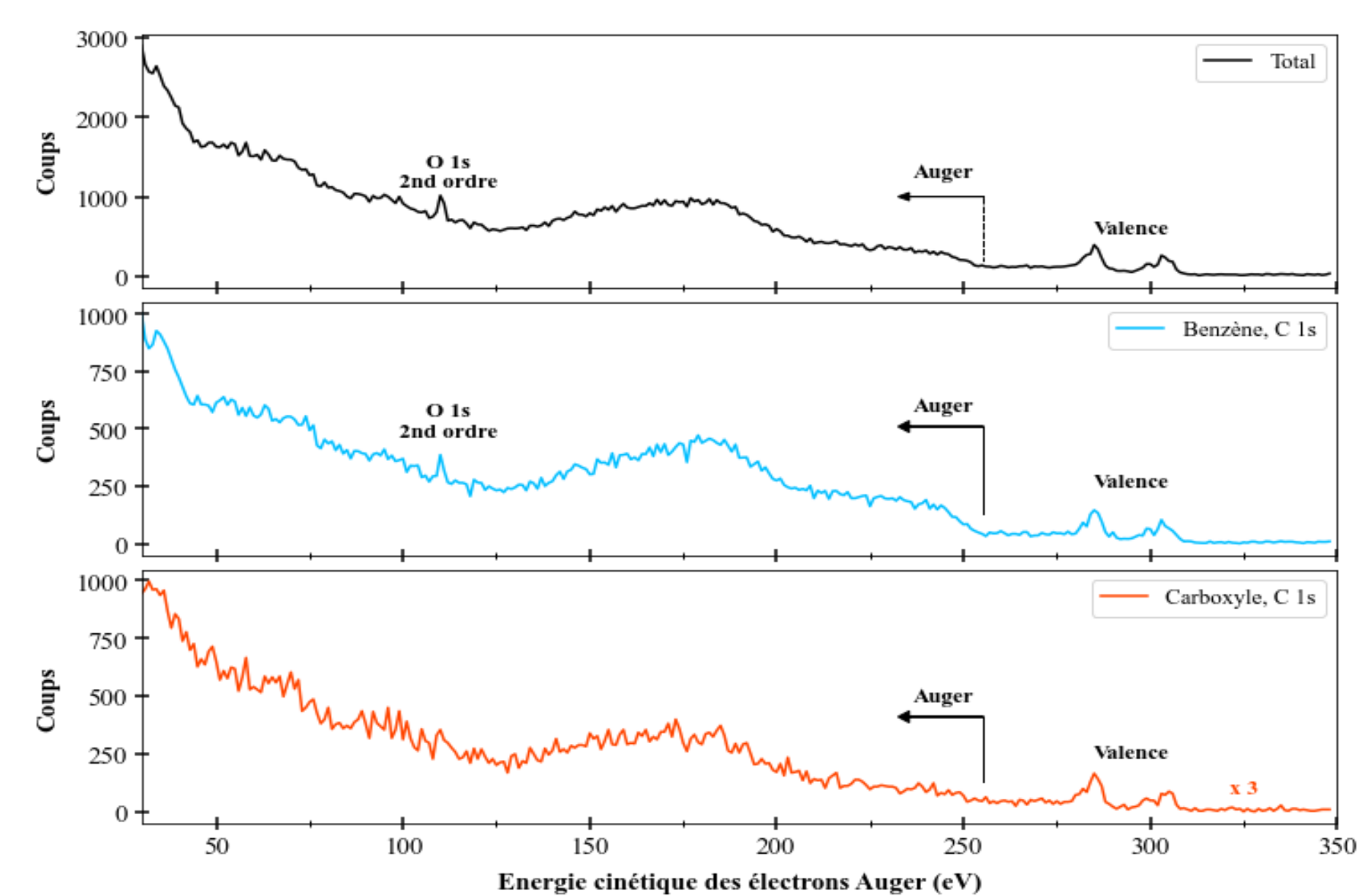


Figure 6 : Spectre total et spectres filtrés en énergie cinétique de l'acide benzoïque

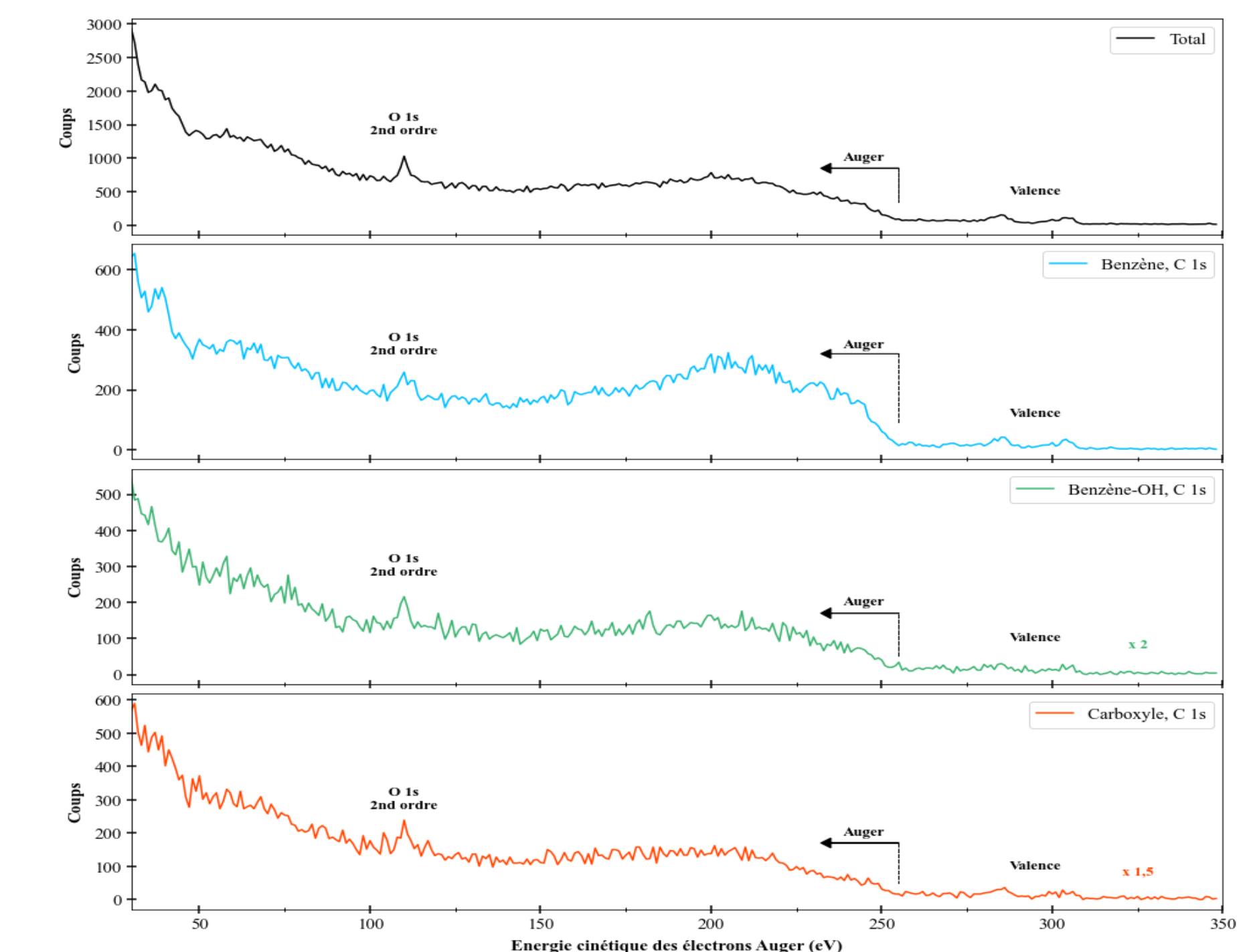


Figure 7 : Spectre total et spectres filtrés en énergie cinétique du 2-hydroxy-benzoate

A partir de ces trois dernières figures, nous pouvons comparer la population des états finaux après relaxation Auger, pour un même site d'ionisation (benzène ou carboxyle) mais pour trois molécules différentes.

→ Différence de population des états finaux pour un **même site** pour **trois molécules différentes**

## 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] L. Huart, <https://www.theses.fr/s266801>, **2022**.
- [5] G. Beamson, *J. Phys. E.*, **1980**, *13*, 64-66
- [6] J. H. D. Eland et al, *Phys. Rev. Lett.*, **2003**, *90*, 4