



Une nouvelle méthode pour identifier l'origine atomique des électrons de valence moléculaires

Dans un atome, on distingue souvent les électrons de « cœur », les plus proches du noyau, et les électrons de « valence » impliqués dans les liaisons entre l'atome et ses voisins s'il fait partie d'une molécule. Dans ce dernier cas, ces électrons de valence sont délocalisés sur l'ensemble de la molécule, et il est difficile de savoir à quel atome ils appartiennent exactement. Grâce à la sensibilité et à la précision des appareils de mesure de la ligne de lumière PLEIADES au synchrotron SOLEIL, une équipe constituée de scientifiques français, suédois et américains est parvenue à remonter à l'origine atomique d'électrons de valence éjectés lorsque des rayons X viennent impacter une molécule. Leurs travaux seront publiés dans la revue en ligne Nature Communications le vendredi 9 mai.

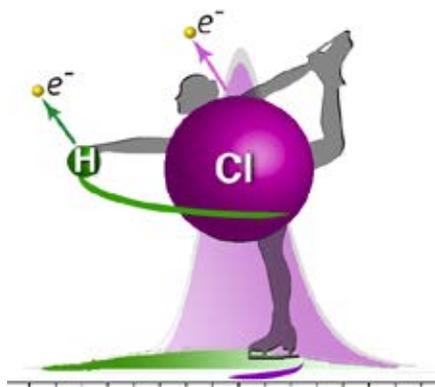


Illustration de l'influence de l'éjection d'électrons en fonction de l'atome d'origine : le spectre d'émission électronique pour un atome léger est beaucoup plus large, et il est décalé (en vert) par rapport à celui d'un atome plus lourd (en violet).

En pratique, cette nouvelle technique d'identification est efficace pour des molécules composées d'atomes lourds et d'autres plus légers. Les chercheurs ont utilisé le rayonnement synchrotron de SOLEIL pour envoyer des photons dans la gamme des rayons X sur une molécule de chlorure d'hydrogène (HCl). Ceux-ci ont une énergie suffisante pour éjecter des électrons de valence de la molécule.

Comment alors remonter à l'atome d'origine de ces électrons? Il faut pour cela s'intéresser au phénomène de rotation moléculaire. Lorsqu'un photon est envoyé sur la molécule, un électron est éjecté et perturbe la rotation moléculaire. Si l'atome est lourd, la perturbation de la rotation moléculaire sera assez faible, alors que s'il s'agit d'un atome léger (comme l'hydrogène, qui ne possède qu'un proton et un électron !) le mouvement de rotation induit par l'éjection de l'électron sera bien plus important. Les chercheurs collectent les électrons éjectés et obtiennent des données sous forme de spectres. Ces « courbes » présentent un « shift » ou décalage horizontal par rapport aux valeurs attendues. Par ailleurs, le spectre pour un atome léger est plus large que pour un atome lourd.

Jusqu'à présent, ce phénomène n'avait jamais été observé. De fait, il a fallu des photons issus de rayons X pour réussir à distinguer les différentes contributions (c'est le cas de courbes verte et violette de la figure), qui sont beaucoup plus proches, et donc plus difficile à distinguer, que ceux observés pour des électrons de cœur. En effet, le transfert de moment angulaire lors de l'éjection de l'électron est plus important, ce qui ici rend la détection plus sensible.

Ces résultats prometteurs sont aussi liés à l'instrumentation de haute précision disponible sur la ligne de lumière PLEIADES. Ils permettent d'envisager d'adapter la méthode à d'autres molécules présentant un « déséquilibre » de masse atomique. Avec en point de mire une problématique de taille : ce sont les électrons de valence qui définissent souvent les propriétés physiques d'un matériau ou la réactivité chimique d'une molécule. La connaissance de la composition des « orbitales moléculaires » obtenue par cette nouvelle méthode pourrait permettre de mieux comprendre certaines propriétés électriques ou magnétiques de la matière, préalable indispensable aux recherches sur tout nouveau matériau.

Référence :

C. Miron, Q. Miao, C. Nicolas, J. D. Bozek, W. Andrałojć, M. Patanen, G. Simões, O. Travnikova, H. Ågren, F. Gel'mukhanov, "Site-selective photoemission from delocalized valence shells induced by molecular rotation", Nature Communications 5, 3816 (2014). DOI: 10.1038/ncomms4816.

Contacts :

Ligne PLEIADES SOLEIL: Catalin Miron, catalin.miron@synchrotron-soleil.fr

Communication SOLEIL: Kevin Lamothe, kevin.lamothe@synchrotron-soleil.fr

Plus d'informations : Ligne PLEIADES

Qu'est-ce que SOLEIL ?

SOLEIL, acronyme de « Source Optimisée de Lumière d'Énergie Intermédiaire du LURE », est un centre de recherche implanté sur le Plateau de Saclay à Saint Aubin (Essonne). Plus concrètement, c'est un accélérateur de particules (des électrons) qui produit le rayonnement synchrotron, lumière extrêmement puissante (10000 fois plus intense que la lumière solaire) qui permet d'explorer la matière inerte ou vivante.

En recherche fondamentale, SOLEIL couvre des besoins en physique, chimie et en sciences des matériaux, en sciences du vivant, en sciences de la terre et de l'atmosphère. Il offre l'utilisation d'une large gamme de méthodes spectroscopiques depuis l'infrarouge jusqu'aux rayons X, et de méthodes structurales en diffraction et diffusion X.

En recherche appliquée, SOLEIL trouve des applications dans des domaines très différents tels que la pharmacie, le médical, la chimie et la pétrochimie, l'environnement, le nucléaire, l'industrie automobile, mais aussi les nanotechnologies, la micromécanique et la microélectronique, etc.