

De la spectroscopie d'électron au contrôle de réactions chimiques

Hassan Abdoul-Carime

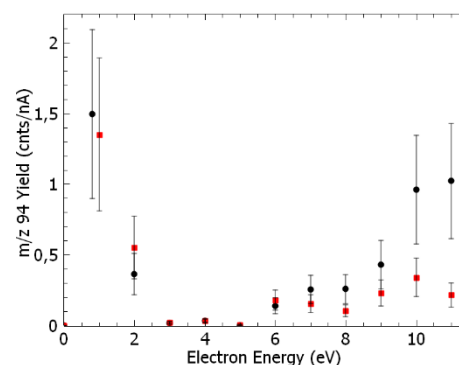
Université Claude Bernard Lyon 1 – Institut de Physique des 2 Infinis de Lyon, UMR5822, F-69003 Lyon, France

Une des tendances en chimie concernent la capacité à maîtriser la synthèse chimique grâce à l'intelligence artificielle [1]. Cibler une réaction spécifique devient probablement l'une des quêtes les actuelles dans le domaine de la synthèse, et le contrôle des processus à l'échelle de l'unité moléculaire par le ciblage de réactifs spécifiques représente la limite ultime.

La photo-activation est un processus bien établi. Les photons d'une longueur d'onde peuvent déclencher spécifiquement des réactions en activant des certaines molécules spécifiques [2]. La photo-synthèse robotisée assistée par l'IA a été récemment proposée [3]. L'avènement des lasers 'atto-seconde' pourront à terme permettre de contrôler la dynamique dans les liaisons chimiques [4].

Les particules tels que les ions et électrons peuvent également d'induire des réactions de synthèse. Jusqu'à maintenant, ces réactions sont réalisées par les particules énergétiques (> keV), illustrés par exemple, en nano-lithographie par faisceau d'électrons ou d'ions [5]. Toutefois, l'irradiation avec les particules énergétiques ne pas conduire à des processus sélectifs, puisque la déposition d'énergie dans le milieu irradié crée des espèces secondaires tels que les ions, radicaux et électrons balistiques ayant une distribution en énergies < 10 eV qui à leur tour, vont induire différentes réactions.

Lors de cet exposé, je décrirai l'interaction entre les électrons de basses énergies (< 10 eV) avec des molécules en phase gazeuse. Je montrerai que la fragmentation moléculaire est contrôlée par l'énergie de ces particules, tout comme la longueur d'onde pour les photons. Enfin, j'illustrerai, à travers quelques exemples, que les informations obtenues en phase gazeuse permettent de contrôler les réactions de synthèse dans des films moléculaires [6,7].



Synthèse de phénol et benzène par irradiation d'un film de chlorobenzène-eau ⁷

¹ e.g., A. Filipa de Almeida, R. Moreira, T. Rodrigues. Synthetic organic chemistry driven by artificial intelligence, *Nat. Rev. Chem.* 3 589-604 (2019).

² G. Goti, K. Manal, J. Sivaguru, L. Dell'Amico, The impact of UV light on synthetic photochemistry and photocatalysis, *Nat. Chem.* 16 684-692 (2024).

³ J.-M. Lu and al., Robotized AI-assisted microfluidic photocatalytic synthesis and screening up to 10,000 reaction a day, *Nature Commun.* 15 8826-(2024).

⁴ F. Calegari, F. Martin, Open question in attochemistry, *Commun. Chem.* 6 183 (2023).

⁵ A. Szkudlarek, Focused ion and electron beams for synthesis and characterization of nanomaterials, *Bielst. J. Nanotechnol.* 16 613-616 (2025).

⁶ H. Abdoul-Carime, G. Thiam, F. Rabilloud, Slow energy electron collision with benzonitrile and benzonitrile-CCl₄ admixture: a combined theoretical and experimental study *Chem.Phys.Chem* e202400287 (2024) ; H. Abdoul-Carime, B. Lathuillière, P. Nédelec, J. Kopyra, Synthesis of benzene and phenol from the irradiation of benzonitrile water ices by (< 10eV) electrons: application to the planets and meteorites surface chemistry, *J. Geophys. Res. Planets* 129 e2023JE007151 (2024).

⁷ H. Abdoul-Carime, J. Kopyra, Activation of Specific Reagents by sub-ionization electrons: chlorobenzene:water films H. Abdoul-Carime, J. Kopyra *Int.J. Mol. Sci.* 26 8751 (2025)