

# La chiralité et la flexibilité moléculaires sondées par une lumière polarisée circulairement

Etienne Rouquet<sup>1</sup>, Darius Lebeau<sup>1</sup>, Sanket Sen<sup>1,2</sup>, Valéria Lepère<sup>1\*</sup>, Anne Zehnacker<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institut de Sciences Moléculaires d'Orsay (ISMO), CNRS-Université Paris Saclay, Orsay, France

<sup>2</sup> Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers, Gif sur Yvette, France

La chiralité, propriété d'une molécule à ne pas être superposable à son image dans un miroir, est massivement présente dans le domaine du vivant, comme dans les peptides par exemple, ou dans le domaine pharmaceutique via les médicaments. Etudier leur structure et leur flexibilité conformationnelle devient alors une problématique majeure pour comprendre les interactions de tels édifices moléculaires avec leur environnement (complexation ou solvation) ou leur cible.

Nous avons développé récemment un dispositif qui permet de sonder le dichroïsme circulaire de photoélectrons (PECD) via un schéma d'ionisation résonant sélectif en conformère (RE2PI)<sup>1,2,3</sup>. On mesure alors l'asymétrie avant-arrière dans la distribution angulaire des photoélectrons pour les molécules chirales orientées aléatoirement et ionisées par une lumière polarisée circulairement. L'étude du complexe du méthyloxirane, molécule chirale, avec du phénol, molécule non chirale, a montré un transfert de chiralité original<sup>4,5</sup>. La micro-solvatation du 1-phényléthanol avec de l'eau ou chaque énantiomère du 2-butanol montre un changement de son PECD suite à la modification du potentiel chiral lors de la diffusion de l'électron.

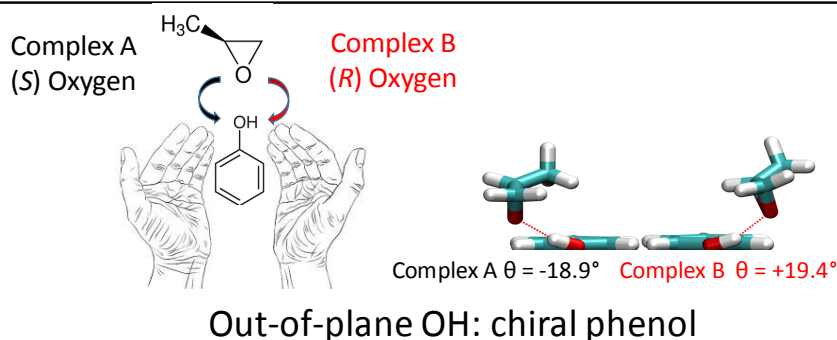


Figure 1 : Complexe entre méthyloxirane et le phénol. Le phénol devient chiral en ayant un groupe OH hors du plan du cycle.

- [1] E. Rouquet et al. "Conformer Selective Photoelectron Circular Dichroism", *Angewandte Chemie Int. Ed.*, e202401423 (2024) <https://doi.org/10.1002/anie.202401423>
- [2] E. Rouquet et al. "Conformer-selective photoelectron circular dichroism: Experimental development and application to nitrogen chirality", *Structural Dynamics* 12, 064301, (2025) <https://doi.org/10.1063/4.0000776>
- [3] E. Rouquet et al. "The role of intramolecular hydrogen bonding in photoelectron circular dichroism: the diastereoisomers of 1-amino-2-indanol.", *Physical Chemistry Chemical Physics*, p2739-2748 (2025) <https://doi.org/10.1039/d4cp04248d>
- [4] E. Rouquet et al. "Induced Photoelectron Circular Dichroism onto an Achiral Chromophore", *Nature communications* 14(1), p6290 (2023) <https://doi.org/10.1038/s41467-023-42002-1>
- [5] E. Rouquet et al. "Induced photoelectron Circular Dichroism as a Probe for Distinguishing Diastereotopic Lone Electrons Pairs", *Angewandte Chemie Int. Ed.*, e3631400 (2026) <https://doi.org/10.1002/anie.3631400>

# Chirality and molecular flexibility probed using circularly polarized light

Etienne Rouquet<sup>1</sup>, Darius Lebeau<sup>1</sup>, Sanket Sen<sup>1,2</sup>, Valéria Lepère<sup>1\*</sup>, Anne Zehnacker<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institut de Sciences Moléculaires d'Orsay (ISMO), CNRS-Université Paris Saclay, Orsay, France

<sup>2</sup> Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers, Gif sur Yvette, France

Chirality, the property of a molecule that cannot not be superimposed onto its mirror image, is ubiquitous in living organisms, such as in peptides, and in the pharmaceutical industry, particularly in drugs. Studying their structure and flexibility are therefore a key challenge for understanding how such molecular structures interact with their environment (complexation or solvation) or their target.

We have recently developed an experimental set-up that enables the measurement of photoelectron circular dichroism (PECD) via a conformer-selective resonant ionization scheme (RE2PI)<sup>1,2,3</sup>. We then measure the forward-backward asymmetry in the angular distribution of photoelectrons for randomly oriented chiral molecules ionized by circularly polarized light. The study of the complex of methyloxirane, a chiral molecule, with phenol, a non-chiral molecule, revealed chirality transfer from the former to the latter<sup>4,5</sup>. Microsolvation of 1-phenylethanol with water or each enantiomer of 2-butanol shows a change in PECD resulting from the modification of the chiral potential during electron scattering.

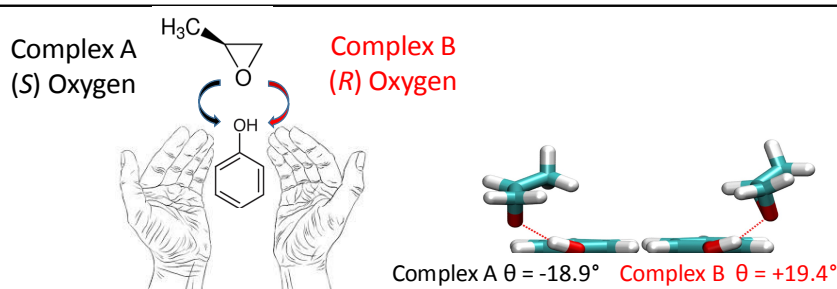


Figure 1 : Complex between methyloxirane and phenol. The phenol becomes chiral with its OH group out of the plane of the ring.

Out-of-plane OH: chiral phenol

- [1] E. Rouquet et al. "Conformer Selective Photoelectron Circular Dichroism", *Angewandte Chemie Int. Ed.*, e202401423 (2024) <https://doi.org/10.1002/anie.202401423>
- [2] E. Rouquet et al. "Conformer-selective photoelectron circular dichroism: Experimental development and application to nitrogen chirality", *Structural Dynamics* 12, 064301, (2025) <https://doi.org/10.1063/4.0000776>
- [3] E. Rouquet et al. "The role of intramolecular hydrogen bonding in photoelectron circular dichroism: the diastereoisomers of 1-amino-2-indanol.", *Physical Chemistry Chemical Physics*, p2739-2748 (2025) <https://doi.org/10.1039/d4cp04248d>
- [4] E. Rouquet et al. "Induced Photoelectron Circular Dichroism onto an Achiral Chromophore", *Nature communications* 14(1), p6290 (2023) <https://doi.org/10.1038/s41467-023-42002-1>
- [5] E. Rouquet et al. "Induced photoelectron Circular Dichroism as a Probe for Distinguishing Diastereotopic Lone Electrons Pairs", *Angewandte Chemie Int. Ed.*, e3631400 (2026) <https://doi.org/10.1002/anie.3631400>