

Caractérisation du transfert d'énergie dans la dissociation induite par collision (CID) ; cas du cation n-butylbenzène avec le xénon

Roland Thissen^{1,2*}, Nicolas Solem^{1,2}, Christian Alcaraz^{1,2}, Nandana Pattathadathil^{1,3}, Kinga Nagy⁴, Ágnes Révész⁴, György Lendvay⁴, Károly Vékey⁴, László Drahos⁴

¹ CNRS, Institut de Chimie Physique, Université Paris-Saclay, UMR 8000, Orsay 91405, France;

² Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers, Gif-sur-Yvette 91192, France

³ Department of Physics, University of Trento, 38123 Trento, Italy

⁴ HUN-REN Research Centre for Natural Sciences, H-1117 Budapest, Magyar Tudósok krt. 2

La dissociation induite par collision (CID) est une méthode d'activation clé en spectrométrie de masse tandem. Cependant, les mécanismes régissant le transfert d'énergie lors des collisions ion-neutre restent encore mal compris [1]. Nous avons abordé cette problématique à l'aide du dispositif expérimental CERISES [2] couplé à la ligne de lumière DESIRS [3] du synchrotron SOLEIL, qui permet un excellent contrôle de l'énergie impartie à l'ion avant et pendant la collision. En utilisant le cation radical n-butylbenzène comme sonde, nous avons réalisé des expériences de CID à collision unique avec du xénon [4] sur une large gamme d'énergies de collision, combinées à des mesures de coïncidence photoélectron-photoion au seuil (TPEPICO) [5] afin de calibrer le comportement de fragmentation. Nous montrons que le transfert d'énergie lors du processus CID se décrit très bien par une fonction bimodale (figure 1) : il comprend des collisions rasantes avec un transfert d'énergie minimal et des supercollisions avec une conversion d'énergie translationnelle en énergie interne quasi complète aux énergies de collision faibles à modérées. La proportion de supercollisions augmente avec l'énergie de collision, devenant prédominante au-dessus de ~ 6 eV, tandis que l'efficacité du transfert d'énergie diminue aux très hautes énergies. Ces résultats affinent la compréhension de la dynamique de la CID, expliquant les divergences observées dans les études précédentes et soulignant que la fragmentation aux énergies de collision analytiques typiques est principalement due à une minorité de collisions hautement inélastiques. Ce modèle bimodal offre un pouvoir prédictif amélioré pour l'interprétation des spectres de fragmentation en spectrométrie de masse.

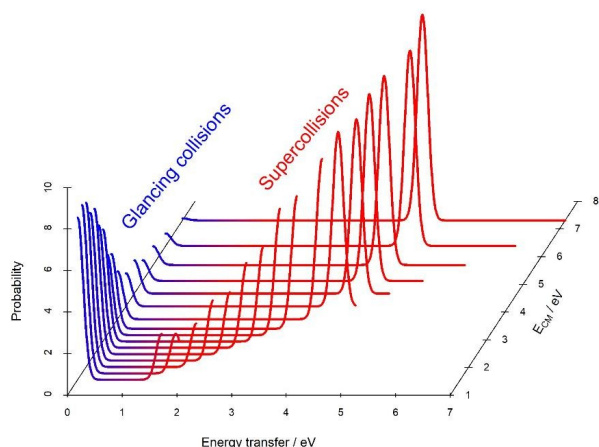


Figure 1 : représentation de la distribution bimodale de transfert entre énergie cinétique et énergie interne, qui permet de décrire l'évolution de la fragmentation du butylbenzène après collision avec le xénon.

[1] Martín-Sómer, A.; Yáñez, M.; Gageot, M.-P.; Spezia, R. *J. Phys. Chem. A* **2014**, *118* (46), 10882–10893.

[2] Cunha de Miranda, B.; Romanzin, C.; Chefdeville, S.; Vuitton, V.; Žabka, J.; Polášek, M.; Alcaraz, C. *J. Phys. Chem. A* **2015**, *119* (23), 6082–6098.

[3] Nahon, L.; De Oliveira, N.; Garcia, G. A.; Gil, J.-F.; Pilette, B.; Marcouillé, O.; Lagarde, B.; Polack, F. *J. Synchrotron Rad* **2012**, *19* (4), 508–520.

[4] Muntean, F.; Armentrout, P. B. Modeling Kinetic Shifts and Competition in Threshold Collision-Induced Dissociation. Case Study: *N*-Butylbenzene Cation Dissociation. *J. Phys. Chem. A* **2003**, *107* (38), 7413.

Baer, T.; Dutuit, O.; Mestdagh, H.; Rolando, C. *J. Phys. Chem.* **1988**, *92* (20), 5674

* correspondant : roland.thissen@cnrs.fr