

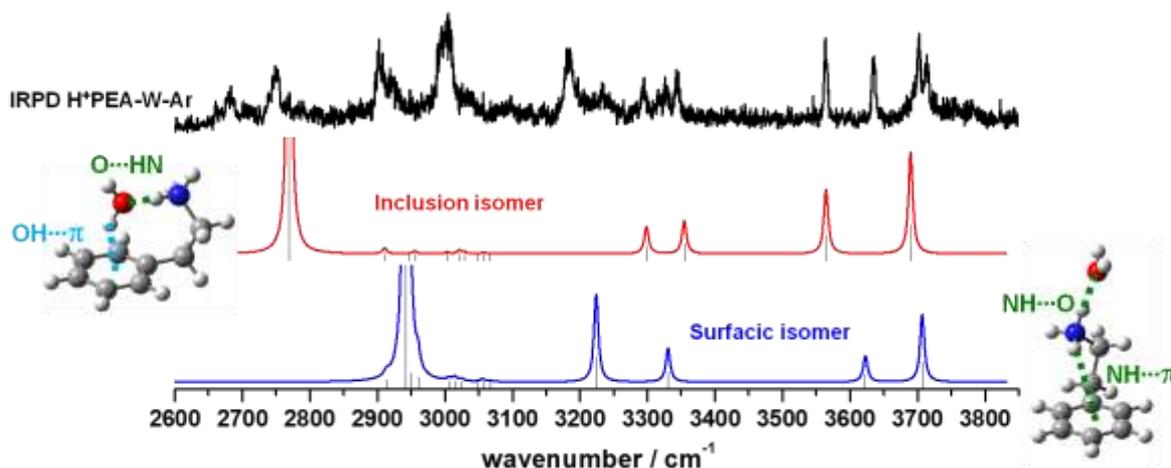
SEMINAIRE ISMO

Aude BOUCHET

Institut für Optik und Atomare Physik, Technische Universität Berlin

Spectroscopie IR de neurotransmetteurs microsolvatés en phase gazeuse : la phényléthylamine protonée et ses complexes hydratés

La caractérisation de la structure tridimensionnelle de molécules d'intérêt biologique, le rôle joué par les interactions inter- et intramoléculaires, notamment avec l'eau, solvant omniprésent en milieu biologique, et leur capacité à former des groupements chargés sont des points clés à aborder pour approfondir la compréhension des phénomènes de reconnaissance au niveau moléculaire dans des environnements biologiques. Les systèmes d'intérêt biologiques ne sont généralement pas neutres en milieu physiologique, mais protonés ou zwitterioniques. La conformation de ces molécules, ainsi que leur couche de solvation, s'en trouve alors modifiées par rapport aux espèces neutres. La phényléthylamine (PEA) est un neurotransmetteur dérivant de la phénylalanine, précurseur de la dopamine ainsi que d'une série de drogues comme les amphétamines. Cette amine aromatique est étudiée sous sa forme protonée (H^+PEA) par spectroscopie vibrationnelle en phase gazeuse (photodissociation infrarouge), associée à des calculs de chimie quantique. La comparaison directe entre PEA, PEA^+ , H^+-PEA et ses hydrates permet de révéler les effets substantiels de la protonation et de l'hydratation sur sa structure. Cette approche permet une meilleure compréhension des principes physiques qui régissent les modèles conformationnels de tels neurotransmetteurs et donc des interactions impliquées dans les processus de neurotransmission. Les résultats obtenus sur la PEA protonée marquée à l'argon montrent qu'une forte interaction intramoléculaire $NH\cdots\pi$ induit un blocage conformationnel du monomère dans une structure repliée. Le complexe monohydraté H^+PEA-H_2O révèle qu'une structure d'inclusion très stable est générée expérimentalement, dans laquelle la molécule d'eau est insérée entre le groupement amine chargé positivement et le groupement aromatique de H^+PEA . Ce ligand agit à la fois comme accepteur de liaison hydrogène avec le groupe NH ($NH\cdots O$) et donneur de liaison hydrogène vers le système π aromatique ($OH\cdots\pi$). Un second isomère, pour lequel l'eau est lié à un groupement NH de "surface" est également identifié.



Mardi 14 janvier 2014 à 11h
Bât 351 – 2^{ème} étage (Bibliothèque)
Université Paris-Sud - 91405 ORSAY Cedex