



Soutenance de thèse

Feriel Ben Nasr

Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay (ISMO), Orsay

Effets de stéréochimie sur la structure et la réactivité de biomolécules : étude théorique et expérimentale

Ce travail vise à comprendre l'effet de la chiralité sur la structure et la photoréactivité de biomolécules, isolées en phase gazeuse. Pour cela, nous combinons des méthodes de spectroscopie laser couplées à la spectrométrie de masse avec des calculs de chimie quantique. La comparaison entre spectres expérimentaux et simulés permet de déterminer la structure des espèces étudiées et de comprendre leur photoréactivité. La première partie étudie la différence de structure entre les deux diastéréoisomères d'un dipeptide cyclique (cyclo Tyr-Tyr). Une seule forme est observée quand les deux résidus tyrosine n'ont pas la même chiralité. Dans cette structure, un des cycles aromatiques est replié sur le cycle peptidique et l'autre est étendu à l'extérieur. Dans le stéréoisomère où les deux résidus ont la même chiralité, cette forme coexiste avec une autre, dans laquelle les deux cycles aromatiques interagissent par une liaison hydrogène. La deuxième partie concerne la structure et la nature des états excités de complexes d'alcaloïdes dérivés de la quinine avec l'acide sulfurique. Les complexes sont formés par l'ajout de l'ion bisulfate sur l'alcaloïde doublement protoné. L'ion bisulfate protège l'alcaloïde de la photodissociation UV grâce à un effet de cage, qui est identique pour la quinine et son pseudoénantiomère la quinidine.

Vendredi 7 juin 2019 à 10 h
Amphithéâtre du bât 520 (3^{ème} étage)
Université Paris-Sud, 91405 Orsay Cedex

La soutenance sera suivie d'un pot auquel vous êtes chaleureusement conviés.