



ID de Contribution: 41

Type: **Orale**

## Liaisons halogène impliquant l'astate : la preuve par l'expérience et la théorie conjuguées

*jeudi 11 juillet 2019 09:00 (15 minutes)*

La chimie de l'astate (At,  $Z = 85$ ), élément chimique rare et radioactif, demeure particulièrement méconnue [1]. L'exploration de cette chimie est un sujet d'étude spécifique au site Nantais, de part l'accès aux productions du cyclotron haute intensité et haute énergie ARRONAX. A l'image des autres éléments de la famille des halogènes, il était attendu que l'astate soit en mesure de former des interactions moléculaires par liaison halogène. La liaison halogène est une interaction attractive très directionnelle qui s'établit entre une région déficiente en électrons de l'halogène, appelée trou sigma ( $\sigma$ ), et un site riche en électrons d'une base de Lewis (B). La synergie entre radiochimistes et chimistes théoriciens a permis de caractériser les tout premiers systèmes impliquant l'astate comme donneur de liaison halogène [2].

En effet, l'astate étant l'élément le plus rare présent sur Terre, les outils spectroscopiques usuels des chimistes sont insuffisants pour investiguer sa chimie. Toutefois, les expériences de radiochimie permettent par des méthodes indirectes d'accéder aux constantes des équilibres [3]. Pour chaque système  $R\text{-At}\cdots\text{B}$  envisagé, des calculs DFT relativistes sont menés sur les complexes possibles de liaison halogène afin de déterminer pour comparaison les constantes thermodynamiques associées.

[1] D. S. Wilbur, *Nat. Chem.*, p 246, **2013**

[2] N. Guo et al., *Nat. Chem.*, p 428, **2018**

[3] N. Guo et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, p 15369, **2016**

### Choix de session parallèle

5.2 La radio-chimie théorique aux interfaces physique/chimie et théorie/expérience

**Author:** Dr GALLAND, Nicolas (Université de Nantes)

**Co-auteurs:** Dr GRATON, Jérôme (Université de Nantes); Dr CHAMPION, Julie (IMT Atlantique); Dr MAURICE, Rémi (CNRS); Dr MONTAVON, Gilles (CNRS)

**Orateur:** Dr GALLAND, Nicolas (Université de Nantes)

**Classification de Session:** Séance Parallèle