

PHYSICAL CHEMISTRY OF MOLECULES AND GRAINS IN SPACE

50th International Meeting of Physical Chemistry
Mont Sainte-Odile (France) 6 – 10 September 1993

The development of new instruments for ground-based (IRAM, VLT, VLBI*) and satellite (ISO, FIRST project*) observations will continue to generate a wealth of new results on physical and chemical behaviour of matter in space. The extreme environmental conditions (dilution, temperature, radiation) under which chemical species are usually found in space give rise to a complex non-equilibrium dynamics involving exotic molecules, radicals and other materials. This provides challenging problems for theoretical and experimental scientists.

The main goal of this conference is to evaluate the state of knowledge in this interdisciplinary field. It is intended to stimulate productive interactions between chemists, physicists and astrophysicists.

- * IRAM = Joint French-German-Spanish Institut de RadioAstronomie Millimétrique
- VLT = Very Large Telescope, Europe Southern Observatory
- VLBI = Very Long-Based Interferometer
- ISO = Infrared Space Observatory, European Space Agency
- FIRST = Project of Far InfraRed Space Telescope.

Main topics

Characterisation, dynamics, reactivity and modelling, related to conditions existing in space, of the following :

- 1 – Small molecules, ions and radicals
 - Spectroscopies
 - Chemical synthesis
 - Radiation- and collision-induced processes
 - Theoretical chemistry
 - Astrochemical models
- 2 – Complex molecules and aggregates
 - Possible carriers of unidentified spectra
 - Carbonaceous materials
 - Weakly-bound entities
 - Prebiotic molecules
 - Absorption and emission processes
 - Theoretical modelling of large systems
- 3 – Grains, solids and their surfaces
 - Grain formation and destruction
 - Ices, refractory materials
 - Physisorption, chemisorption processes
 - Catalytic reactions
 - Effects of radiations

Lectures, panel discussions, contributions, proceedings

There will be two panel discussions – The preliminary programme (invited lectures, call for papers) will be available during Autumn 1992 – The Proceedings (lectures, oral & poster contributions, discussions and panel discussions) will be fully published by the American Institute of Physics.

Information & preliminary programme : SFC, Division de Chimie physique, 10, rue Vauquelin, F-75005 Paris – Tél : (1) 47 07 54 48. Fax : (1) 43 31 59 45.

Organising committee

P Brechignac (LPPM, Orsay) – Y Ellinger (Radioastronomie ENS) – S Leach (LPPM + Obs de Paris-Meudon) – A Leger (GPS/ENS, Paris VI) – R Mc Carroll (Dyn Moléc, Paris VI) – I Nenner (CEA, DRECAM + LURE), Chairwoman – E Roueff (Obs de Paris-Meudon) – C Trojanowsky (SFC/DCP), secretary.

Index

A

- Abboud J, Notario R, Correlation analyse in organic chemistry (CAOC): the cross-road, 1531
- Abdel-Ghaffar AA — See Anwar A *et al*, 681
- Aboukais A — See Taouk B *et al*, 435 — See Bechara R *et al*, 853
- Abrantes LM — See Chao F *et al*, 1009
- Achour Z, Bourdet JB, Bouroukba M, Dirand M, Structural evolution as a function of temperature for the mixtures *n*-docosan *n*-tetracosan for various concentrations between 20 and 48 mol percent in *n*-tetracosan. Solid-liquid equilibrium diagram of the system *n*-C₂₂-*n*-C₂₄*, 707
- Addou M — ###, Kadiri A, Pb_{0,875}U_{0,125}F_{2,25} thin films: preparation, characterization, optical and electrical properties*, 1477 — See Douniam R *et al*, 2091
- Ades D — See Faïd K *et al*, 1019
- Aeiyach S — See Marsault JP *et al*, 1167
- Agafonov V, Céolin R, Sizaret PY, Dworkin A, André D, Szwarc H, Fabre C, Rassat A, Straver L, Dugué J, Taylor R, Zahab A, Bernier P, Morphological versatility of solid C₆₀ fullerene: I. Solid state studies of yellow plates grown from benzene solutions, 1879
- Al Fatimi B — See Lamy-Pitara E *et al*, 2045
- Alcobé X — See Barrio M *et al*, 695
- Ali Benamara A, Galtier M, Sauvajol JL, Optical properties of orientated polyacetylene doped with cesium in vapor phase*, 1245
- Alphonse P, Moyen F, Galletti D, Mauret P, Comparative deactivation study of nickel and palladium catalysts in liquid phase hydrogenation, 2029
- André D — See Agafonov V *et al*, 1879
- André JJ — See Petit P *et al*, 567
- Andrieux CP, Attias AJ, Audebert P, Bloch B, Vautrin M, Epoxy resins/polypyrrole composites: synthesis and characterization*, 1125
- Anis SS, Kinetic study of the oxidation of ethylenediaminetetraacetatocobalt(II) complex by peroxodisulfate ion, 657
- Anwar A, Abdel-Ghaffar AA, Countercation effects on surface and catalytic properties of 12-tungstophosphates, 681
- Aouial M — See Laachach A *et al*, 2011
- Arbelot M, Chanon M, Thiocarbonyl reactivity and molecular orbital correlations, 1667
- Aruga R, Multivariate chemometric treatment of thermodynamic data: a tool for the investigation and the prediction of properties of complexes in solution, 1853
- Athouël L — ###, Riou MT, Froyer G, Louarn G, Lefrant S, Siove A, Chevrot C, Characterization of paraxexiphenyl thin films deposited under vacuum*, 1271 — ###, Froyer G, Salvi M, Gauneau M, Louarn G, Lefrant S, Moliton A, Ion implantation in paraxexiphenyl: implantation conditions effects on physical properties of thin films*, 1279 — ###, Pelous Y, Froyer G, Louarn G, Lefrant S, AsF₅ oxidation of paraxexiphenyl thin films*, 1285
- Attias AJ — See Andrieux CP *et al*, 1125
- Aubard J — See Marsault JP *et al*, 1167
- Audebert P — See Andrieux CP *et al*, 1125
- Audier HE — See Morizur JP *et al*, 1551
- Aumelas A, Chiche L, Brun E, Mahé E, Le Nguyen D, Sizun P, Berthault P, Perly B, Vasoactive intestinal contractor (VIC) peptide structure in solution as determined by proton NMR, 175

B

- Balaban AT, Balaban TS, Correlations using topological indices based on real graph invariants, 1735
- Balaban TS — See Balaban AT *et al*, 1735
- Bamba SEH, Proutière A, Chabanel M, Rayleigh light scattering, isothermal compressibility and Kerr constant of pure liquids. Agreement obtained with consistent theoretical relations, 615
- Bannard RAB — See Buncel E *et al*, 1591
- Barbier J — See Lamy-Pitara E *et al*, 2045
- Barbontin JN — See Sarazin C *et al*, 541
- Baret P — See Serratrice G *et al*, 549
- Barret P — See Fernandez L *et al*, 453
- Barrio M, Font J, López DO, Muntasell J, Tamarit JL, Chanh NB, Haget Y, Teisseire M, Guion J, Alcobé X, Binary system neopentylglycol/penta-

- erythritol, 695
- Batamack P, Dorémieux-Morin C, Fraissard J, Study of zeolite acidity by broad-line ^1H NMR at 4 K. Comparison with results of ^1H HR-NMR (MAS) at ambient temperature, 423
- Batis H — See Hamzaoui H *et al*, 95 — See Hamzaoui H *et al*, 111
- Bechara R, Aboukias A, Hubaut R, Wrobel G, D'Huysser A, Bonnelle JP, Hydrogenation on copper chromite catalyst. Role of the cuprous ions in the methanol synthesis from syngas, 853
- Begin D, Lelaurain M, Billaud D, Comparative study of 001 reflexions in $(\text{CH}(\text{MCl}_4)_x)_y$ compounds with M = In, Ga and Fe*, 1263
- Beguine CG — See Serratrice G *et al*, 549
- Bein T — See Esnouf S *et al*, 1137
- Belloni J — See Malkov A *et al*, 885
- Belmeliani A, Perrin D, Martin R, Hetero-homogenous pyrolysis of propane: selective dehydrogenation in reactors packed with stainless steel at 500°C*, 727
- Belorgeot C, Lucas B, Ratier B, Moliton A, François B, Infrared study and dielectric properties of virgin and implanted PPP films*, 1291
- Ben Bachir A — See Laachach A *et al*, 2011
- Benkedda Y — See Leblond J *et al*, 307
- Bennani D — See Taouk B *et al*, 435
- Benoit C — See Peng XZ *et al*, 1085 — See Poussigue G *et al*, 1091 — See El Machtani-Idrissi J *et al*, 1239
- Berguecia MA — See Squella JA *et al*, 669
- Bernassau JM — See Sizun P *et al*, 183
- Bernede JC — See Makhlouki M *et al*, 1155
- Bernier JL — See Cotelte P *et al*, 191
- Bernier P — See Foxonot N *et al*, 977 — See Chiali S *et al*, 1233 — See Simon E *et al*, 1257 — See Agafonov V *et al*, 1879
- Berthault P — See Aumelas A *et al*, 175
- Berthomieu D — See Morizur JP *et al*, 1551
- Bertrandie D — See Fernandez L *et al*, 453
- Bessada C — See Taulelle F *et al*, 379
- Bessière J — See Perdicakis M *et al*, 2067
- Beuneu G — See Esnouf S *et al*, 1137
- Bidan G — See Fabre B *et al*, 1053 — ###, Billon M, Divisa-Blohorn B, Kern JM, Sauvage JP, Polythiophene functionalization by an intertwined complex of copper*, 1045
- Billaud D — See Saldi F *et al*, 997 — See Chen XB *et al*, 1179 — See Begin D *et al*, 1263
- Billon M — See Bidan G *et al*, 1045
- Binet C — ###, Jadi A, Lavalley JC, Adsorption of acetonitrile on cerium oxide: an infrared spectroscopic study according to the reduction state of the oxide*, 31 — ###, Jadi A, Lavalley JC, Surface reduction state of ceria: a FT-IR study of methanol adsorption*, 1441 — ###, Jadi A, Lavalley JC, IR study of carbon dioxide and carbon monoxide adsorption onto ceria: effect of the reduction state of ceria*, 1779
- Bligny R — See Roby C *et al*, 253
- Bloch B — See Andrieux CP *et al*, 1125
- Boettner JC — See Dagaud P *et al*, 867 — See Dagaud P *et al*, 1373
- Bonnelle JP — See Bechara R *et al*, 853
- Bonnet A — See Makhlouki M *et al*, 1155
- Bonnet M, Foucat L, Dupuis J, Renou JP, Study of collagen using liquid and solid ^{13}C NMR, 227
- Bordwell FG, Ji GZ, Zhang S, Stabilizing and destabilizing effects of structural changes on radical stabilities, 1623
- Bouaziz S — See Guittet E *et al*, 125 — ###, van Heijenoort C, Guittet E, Lallemand JY, Application of homonuclear three-dimensional NMR spectroscopy to the study of a protein in solution, 147
- Bouirig H, Eloy D, Jardon P, Generation and reactions of singlet oxygen photosensitized by hypericin in dipalmitoylphosphatidylcholine vesicles*, 1391
- Boukhari A — See El Belghiti AA *et al*, 845
- Bourbigot S, Delobel R, Le Bras M, Schmidt Y, Relation between limiting oxygen index and invariant activation energy. Application to the polypropylene-ammonium polyphosphate-pentaerythritol system, 1835
- Bourdet JB — See Achour Z *et al*, 707
- Bouroukba M — See Achour Z *et al*, 707
- Bowden K, The electrostatic field-inductive effects controversy, 1647
- Brickmann J, Molecular graphics: how to see a molecular scenario with the eyes of a molecule, 1709
- Brun E — See Aumelas A *et al*, 175
- Bruschini C, Godon C, Lefrant S, Perichaud A, Rouquero F, Kinetic approach of PVC deshydrochlorination by liquid-solid phase transfer catalysis*, 1227
- Buisson JP — See Louarn G *et al*, 987 — See Quillard S *et al*, 1201
- Buncel E, Dunn EJ, van Truong Ng, Pregel MJ, Bannard RAB, Purdon JG, Solvent modulation of metal-ion effects in nucleophilic displacement at a phosphorus center, 1591

C

- Cadene M — See Youm I *et al*, 1105 — See Youm I *et al*, 1111

- Canioni P — See Portais JC *et al*, 209
 Cansell F — See Guyot A *et al*, 745
 Capelle S, Planckaert B, Cotelle P, Catteau JP, Hydroxyl radical scavenging activity of salicylic acid and its hydroxylated metabolites. An ESR study, 561
 Carlier M — See Ribaucour M *et al*, 2127
 Cassels BK — See Squella JA *et al*, 669
 Cathonnet M — See Dagaud P *et al*, 867 — See Dagaud P *et al*, 1373
 Catteau JP — See Capelle S *et al*, 561
 Cavaille JY — See Guyot A *et al*, 745
 Céolin R — See Agafonov V *et al*, 1879
 Chabanel M — See Bamba SEH *et al*, 615
 Chahraoui D, Kossanyi J, Behaviour of pthalocyanin singlet state in electron exchange reactions*, 47
 Chan P — See Cotelle P *et al*, 191
 Khanh NB — See Barrio M *et al*, 695
 Chanon M — See Arbelot M *et al*, 1667
 Chao F, Costa M, Museux E, Levart E, Abrantes LM, Ellipsometric study of electropolymerisation of poly-methyl-3-thiophene under various conditions*, 1009
 Chapon E — See Morizur JP *et al*, 1551
 Chardaire-Rivière C — See Roussel JC *et al*, 325
 Chartier P — See Nguyen Cong H *et al*, 1071
 Charton M, The quantitative description of the variation of protein properties and bioactivities with side chain structure, 1689
 Chastrette M — See Devillers J *et al*, 1703
 Chehimi MM, Pigois-Landureau E, Delamar M, Characterization of conducting polymers by inverse gas chromatography, 1173
 Chemseddine A — See Judenstein P *et al*, 1469
 Chen XB, Billaud D, Elaboration and characterization of polypyrrole-carbon composites, 1179
 Cherifi A — ###, Gouton P, Toureille A, Reboul JP, Conducting polymer effect on charges migration in cables*, 1337 — See Gouton P *et al*, 1345
 Chevalier Y — See Guyot A *et al*, 745
 Chevrot C — See Faid K *et al*, 1019 — See Athouel L *et al*, 1271 — See Faid K *et al*, 1305
 Chiali S, Bernier P, Nuffer R, Doping species NMR in alkaline doped polyacetylene*, 1233
 Chiche L — See Aumelas A *et al*, 175
 Chorro C — See Peng XZ *et al*, 1085 — See Poussigues G *et al*, 1091
 Conan A — See Makhlouki M *et al*, 1155
 Conard J, Perrin C, Pena O, Sergent M, Use of a ¹⁹F NMR probe for the study of the local magnetic structure in the AF and SC HTc YBaCuO series: experimental lights on the HTc superconductivity mechanism, 393
 Costa M — See Chao F *et al*, 1009
 Cotelle N — See Cotelle P *et al*, 191
 Cotelle P — ###, Chan P, Cotelle N, Bernier JL, Hénichart JP, Active site model peptides of glutathione peroxidase: a ⁷⁷Se NMR study, 191 — See Capelle S *et al*, 561
 Couty R — See Fernandez L *et al*, 453
 Crusson E — See Taouk B *et al*, 435
 Cung MT, Marraud M, Tsikaris V, Papadoulis I, Tzartos SJ, Antigen-antibody interactions study by 2D-¹H NMR: molecular recognition between decapeptide analogues of the acetylcholine receptor α 67-76 fragment and the anti-AChR antibodies*, 167
- D**
- D'Huysser A — See Bechara R *et al*, 853
 Dagaud P — ###, Boettner JC, Cathonnet M, Kinetic modeling of ethanol pyrolysis and combustion, 867 — ###, Tan Y, Revel J, Boettner JC, Cathonnet M, Kinetics of premixed laminar one-dimensional freely propagating flames, 1373
 Dahn H, Pechy P, ¹⁷O NMR of terminal oxygen: application of the tool of increasing electron demand, 1683
 Dauphin G — See Rabaste F *et al*, 217
 De Paoli MA, Felisberti MI, Zoppi RA, Duek EAR, Mano V, Tassi EL, Chemical and electrochemical preparation of conductive polymeric composites, 1185
 Decressain R — See Taouk B *et al*, 435
 Delabouglise D, Garnier F, Control of the interface properties of polypyrrole substituted by peptides, 1131
 Delalu H, Marchand A, Kinetics of the (N-amino-aza-3-bicyclo[3,3,0]octane) formation from NH₂Cl and NHCl- on aza-3-bicyclo[3,3,0]octane in concentrated alkaline solution*, 1413
 Delamar M — See Chehimi MM *et al*, 1173
 Delannoy P — See Horowitz G *et al*, 1037
 Deleuze C — See Sizun P *et al*, 183 — See Jousse F *et al*, 1143
 Delobel R — See Bourbigot S *et al*, 1835
 Delort AM — See Rabaste F *et al*, 217
 Deslouis C, El Rhazi M, Musiani MM, Tribollet B, Polyaniline protonation equilibrium effect on ferrocyanide oxidation reaction*, 1193
 Desvaux H, New expressions of the spin-spin coupling hamiltonian. Application to the external field dependence*, 1
 Devillers J, Karcher W, Chastrette M,

- Domine D, Multivariate structure-environmental fate relationships for chlorinated chemicals, 1703
- di Meglio JM, Gandeboeuf P, Influence of wetting conditions in the formation of breath figures on fibers, 1357
- Dianoux AJ — See Sauvajol JL *et al*, 969
- Diard JP, Le Gorrec B, Montella C, Re-examination of the validity conditions of the redox impedance measurements. I. Reversible electron transfer*, 2153
- Dirand M — See Achour Z *et al*, 707
- Divisa-Blohorn B — See Bidan G *et al*, 1045
- Djurado D — See Sauvajol JL *et al*, 969
- Dobler F — See Guyot A *et al*, 745
- Domine D — See Devillers J *et al*, 1703
- Dorémieux-Morin C — See Batamack P *et al*, 423
- Dosseh G, Rousseau B, Fuchs AH, Structural characterization of a crude oil by one and two dimensional nuclear magnetic resonance spectroscopy, 533
- Douce R — See Roby C *et al*, 253
- Dounia R, Kadiri A, Addou M, Study of electrooptical and band model of In_2O_3 thin films*, 2091
- Dubois JC — See Mahé L *et al*, 1149
- Dubois JE, Loukianoff M, Mercier C, Topology and the quest for structural knowledge, 1493
- Duek EAR — See De Paoli MA *et al*, 1185
- Dufourc EJ — See Krajewski-Bertrand MA *et al*, 237 — ###, Mayer C, Stohrer J, Kothe G, 31P and ^1H NMR pulse sequences to measure lineshapes, T1Z and T2E relaxation times in biological membranes, 243
- Dugué J — See Agafonov V *et al*, 1879
- Dunn EJ — See Buncel E *et al*, 1591
- Dupuis J — See Bonnet M *et al*, 227
- Dworkin A — See Agafonov V *et al*, 1879

E

- El Belghiti AA, Boukhari A, Holt E, Crystal structure of $\text{CdSr}(\text{PO}_3)_4$ polyphosphate*, 845
- El Machtani-Idrissi J, Benoit C, Poussigues G, Cis-trans defects in polyacetylene*, 1239
- El Rhazi M — See Deslouis C *et al*, 1193
- El-Sheikh MY, Habib AM, Gemeay AH, Zaki AB, Catalytic decomposition of hydrogen peroxide in presence of Ni(II)-ethanolamine complex ions sorbed on Dowex 50W resin, 2057
- Eloy D — ###, Escaffre P, Gautron R, Jardon P, Sensitization of spirooxazines photochromism by

- triplet-triplet energy transfer*, 897 — See Bourig H *et al*, 1391
- Elzawawy FM — See Guindy NM *et al*, 629
- Enzel P — See Esnouf S *et al*, 1137
- Escaffre P — See Eloy D *et al*, 897
- Esnouf S, Beuneu G, Mory J, Zuppiroli L, Enzel P, Bein T, Spins and charge carriers of conducting polymers encapsulated in zeolites channels*, 1137
- Estévez CM — See Vásquez L *et al*, 595
- Ettaik H — See Nguyen TP *et al*, 1319
- Exner O, Comparison of a theory with experimental results, 1573

F

- Fabre B, Bidan G, Fichou D, Electropolymerization of thiophene, bithiophene et *terthiophene* in the presence of Keggin-type heteropolyanions*, 1053
- Fabre C — See Agafonov V *et al*, 1879
- Facchini L, Legrand AP, An approach of the conformation of the poly(ethylene oxide) chains grafted on silica using ^1H NMR*, 469
- Faid K — ###, Ades D, Siove A, Chevrot C, (phenylen-carbazolylen)s co-polymers: new electro active materials with adjustable properties*, 1019 — ###, Siove A, Chevrot C, Riou MT, Froyer G, Synthesis and characterization of linear oligophenylenes*, 1305
- Fan BT, Xiao L, Lapluye G, Interaction of metallic ions with basement membranes, 1911
- Fave JL, Schott M, Conjugation length, meaning and implication*, 931
- Felisberti MI — See De Paoli MA *et al*, 1185
- Fernandez L, Zanni H, Couty R, Barret P, Bertrandie D, Contribution of ^{29}Si high resolution NMR to the study of concrete alkali-aggregates reaction, 453
- Fichou D — See Fabre B *et al*, 1053 — See Xu B *et al*, 1097 — See Xu B *et al*, 1117
- Fischer JE — See Sauvajol JL *et al*, 969
- Fluekiger P — See Morgantini PY *et al*, 1723
- Font J — See Barrio M *et al*, 695
- Foucat L — See Bonnet M *et al*, 227
- Fournier M — See Taouk B *et al*, 435
- Foxonot N, Bernier P, Voit J, Conductivity of n-doped polyacetylene: dependence on doping level and temperature, 977
- Fraissard J — See Batamack P *et al*, 423
- François B — ###, Synthesis and characterization of co-polymers with conjugated sequences*, 957 — See Olinga T *et al*, 1079 — See Belorgeot C *et al*, 1291 — See Widawski G *et*

- al*, 1331
 Fraoua K — See Marsault JP *et al*, 1167
 Frihmat R — See Mimouni M *et al*, 2169
 Froyer G — See Athouël L *et al*, 1271 —
 See Athouël L *et al*, 1279 — See
 Athouël L *et al*, 1285 — See Faid K *et al*,
 1305 — See Ratier B *et al*, 1313
 — See Ratier B *et al*, 1325
 Fuchs AH — See Dosseh G *et al*, 533

G

- Gache Y, Simonet J, New conducting
 polymers obtained by anodic oxidation
 of ethers disubstituted benzene*,
 1027
 Galletti D — See Alphonse P *et al*, 2029
 Galtier M — See Ali Benamara A *et al*, 1245
 Gandeboeuf P — See di Meglio JM *et al*,
 1357
 Garin F — See Thiébaud JM *et al*, 1427
 Garnier F — See Lang P *et al*, 1063 — See
 Peng XZ *et al*, 1085 — See Xu B *et al*,
 1097 — See Xu B *et al*, 1117 —
 See Delabouglise D *et al*, 1131
 Gasteiger J — See Tusar M *et al*, 1493
 Gauneau M — See Athouël L *et al*, 1279 —
 See Ratier B *et al*, 1325
 Gautier S — See Mansuy H *et al*, 525
 Gautron R — See Eloy D *et al*, 897
 Gellon G — See Serratrice G *et al*, 549
 Gemeay AH — See El-Sheikh MY *et al*, 2057
 Genies E, Marchesiello M, Glucose sensor:
 glucose oxidase trapping in
 polypyrrole film. Redox mediator use
 of p-benzoquinone*, 1161
 Gérardin C, Taulelle F, Livage J, Pyrolysis of
 a polyvinylsilazane, polymeric
 precursor for silicon carbonitride:
 structural investigation by ¹H, ¹³C,
²⁹Si, ¹⁵N and ¹⁴N nuclear magnetic
 resonance, 461
 Geskin VM — ###, Electrodeposition of
 polyaniline onto non-noble metals. I.
 Titanium, 1215 — ###,
 Electrodeposition of polyaniline onto
 non-noble metals. II. Nickel, 1221
 Ghossoub D — See Taouk B *et al*, 435
 Godfrey M, Correlation analysis in the eluci-
 dation of reaction mechanisms: some
 issues, 1661
 Godon C — See Lefrant S *et al*, 947 — See
 Bruschini C *et al*, 1227
 Goethals G — See Sarazin C *et al*, 541
 Gonnord MF — See Tuel A *et al*, 477
 Gouton P — See Cherifi A *et al*, 1337 —
 ###, Cherifi A, Reboul JP, Tourelle
 A, Conducting polymers application to
 capacitors electrodes realization*,
 1345
 Graillat C — See Guyot A *et al*, 745

- Grigor'ev VY — See Raevsky OA *et al*,
 1747
 Grimmer AR, Solid state 31p NMR of inor-
 ganic phosphates, 413
 Guelton M — See Taouk B *et al*, 435
 Guérin H, Vibrational-rotational partition func-
 tions for homonuclear Van der Waals
 dimers: calculation of equilibrium con-
 stants for the formation to Ar-Ar, 25
 Guille B — See Ratier B *et al*, 1313
 Guillot J — See Hidalgo M *et al*, 505
 Guindy NM, Elzawawy FM, Sabry DY,
 Photochemical hydrogen formation
 from a water-soluble acetophenone
 derivative in presence of colloidal
 platinum, 629
 Guion J — See Barrio M *et al*, 695
 Guittet E — ###, Bouaziz S, Robin M, van
 Heijenoort C, Application of three-di-
 mensional NMR to protein studies: re-
 cent developments*, 125 — See
 Bouaziz S *et al*, 147
 Guseila L — See Tomus EJ *et al*, 1487
 Guyot A, Cansell F, Cavaille JY, Chevalier
 Y, Dobler F, Graillat C, Henry F,
 Hidalgo M, Holl Y, Lambla M, Mura
 JL, Perez J, Pichot C, Pith T, Riess G,
 Rios L, Filmogene dispersions of
 copolymer latex models. Synthesis-
 structure-properties relationships*,
 745
 Guyot G — See Rabaste F *et al*, 217

H

- Habib AM — See El-Sheikh MY *et al*, 2057
 Hadweh S, Huet J, Jouini M, Lapluye G,
 Spectroscopic and potentiometric
 studies on copper(II) complexes with
 tripeptides containing alkyl side-
 chains, 1973
 Haget Y — See Barrio M *et al*, 695
 Hamieh T, Siffert B, Surface charge density
 and surface potential calculations of
 a charged sphere in disymmetrical
 electrolytes*, 1799
 Hamzaoui H — ###, Batis H, Physico-chemi-
 cal properties of zirconium
 phosphates. I. Preparation and
 characterization*, 95 — ###, Batis H,
 Physico-chemical properties of zirconium
 phosphates. II. Kinetic of isopropanol
 dehydration to propene*, 111
 Hebrant M — See Mimouni M *et al*, 2169
 Hénichart JP — See Cotelle P *et al*, 191
 Henry F — See Guyot A *et al*, 745
 Hermann JM, Formal kinetics of a system of
 isokinetic consecutive reactions: some
 applications to heterogenous catalysis*,
 77
 Hernández A — See Squella JA *et al*, 669
 Hervé M — See Tran-Dinh S *et al*, 65

- Hidalgo M — ###, Guillot J, Llauro-Darricades MF, Waton H, Pétiaud R, Tip(H) characterization of films obtained from latexes prepared by emulsion polymerization*, 505 — See Guyot A *et al*, 745
- Hirschinger J, Deuteron NMR and modelling in solid polymers, 399
- Holl Y — See Guyot A *et al*, 745
- Holt E — See El Belghiti AA *et al*, 845
- Hommel H — See Taibi H *et al*, 445 — See Tuel A *et al*, 477
- Horowitz G — ###, Delannoy P, Field effect transistors based on polyconjugated organic oligomers. Fabrication, models and comparison with inorganic semiconductors*, 1037 — See Peng XZ *et al*, 1085 — See Xu B *et al*, 1117
- Hubaut R — See Bechara R *et al*, 853
- Huet J — See Hadweh S *et al*, 1973 — See Mrabet B *et al*, 2187

J

- Jadi A — See Binet C *et al*, 31 — See Binet C *et al*, 1441 — See Binet C *et al*, 1779
- Jano I — ###, Approximate method for calculating the valence-shell ionization potentials, 915 — ###, Study of the solvents effect on the electronic spectra of betaine and azo-merocyanine dyes, 1951
- Jardon P — See Eloy D *et al*, 897 — See Bouirig H *et al*, 1391
- Javelot S — See Leblond J *et al*, 307
- Jeminet G — See Rabaste F *et al*, 217 — See Mimouni M *et al*, 2169
- Ji GZ — See Bordwell FG *et al*, 1623
- Johari GP, Molecular kinetics in amorphous solids, 2073
- Joshi N — See Tsantili-Kakoulidou A *et al*, 1729
- Jouini M — See Hadweh S *et al*, 1973 — See Mrabet B *et al*, 2187
- Jousse F, Deleuze C, Olmedo L, Synthesis and microwave characterization of polypyrrole-PVC blends*, 1143
- Judenstein P, Chemseddine A, Sanchez C, Photoelectrochemical properties of tungstene oxide gels*, 1469
- Juillard J — See Mimouni M *et al*, 2169

K

- Kadiri A — See Addou M *et al*, 1477 — See Douniam R *et al*, 2091
- Karcher W — See Devillers J *et al*, 1703

- Kern JM — See Bidan G *et al*, 1045
- Keutel D — See Spange S *et al*, 1615
- Kieffer B — See Koehl P *et al*, 135
- Kier LB — See Tsantili-Kakoulidou A *et al*, 1729
- Kitagawa T — See Takeushi K *et al*, 1631
- Kjireev NS — See Raevsky OA *et al*, 1747
- Koehl P, Kieffer B, Lèièvre JF, Computer-assisted assignment of biological macromolecule NMR spectra, 135
- Köppel A, Superacidity of neutral Brönsted acids in gas phase, 1545
- Kossanyi J — See Chahraoui D *et al*, 47
- Kotchevar AT — See Kreevoy M *et al*, 1585
- Kothe G — See Dufourc EJ *et al*, 243
- Krajewski-Bertrand MA, Nakatani Y, Ourisson G, Dufourc EJ, Milon A, Anisotropic ²H-NMR spin-lattice relaxation in oriented bilayers of DMPC and DMPC + cholesterol, 237
- Kreevoy M, Kotchevar AT, Dynamic effects of solvent on the Brönsted α , 1585
- Krygowski TM, Crystallographic studies of inter and intra molecular interactions affecting aromatic character of π -electron systems, 1609

L

- Laachach A, Aouial M, Srhiri A, Ben Bachir A, Corrosion inhibition of a 70/30 cupronickel in a 3% NaCl medium by various azoles, 2011
- Labouesse J — See Portais JC *et al*, 209
- Lacaze PC — See Marsault JP *et al*, 1167
- Lallemant JY — See Bouaziz S *et al*, 147
- Lallemant M — See Sansfeld A *et al*, 799
- Lambla M — See Guyot A *et al*, 745
- Lamy-Pitara E, Al Fatimi B, Barbier J, Effect of temperature on the deactivation of platinum catalyst by lead*, 2045
- Lancelot G — See Lopez S *et al*, 157
- Lang P, Mekhalif Z, Garnier F, Blocking and chemical pretreatments of platinum electrode for the electropolymerization of thiophenes, 1063
- Laplaze D — See Youm I *et al*, 1105 — See Youm I *et al*, 1111
- Lapluye G — See Fan BT *et al*, 1911 — See Hadweh S *et al*, 1973 — See Mrabet B *et al*, 2187
- Laszlo P — See Mahé L *et al*, 1149
- Lavalley JC — See Binet C *et al*, 31 — See Binet C *et al*, 1441 — See Binet C *et al*, 1779
- Le Bras M — See Bourbigot S *et al*, 1835
- Le Gorrec B — See Diard JP *et al*, 2153
- Le Hue C — See Ratier B *et al*, 1325
- Le Nguyen D — See Aumelas A *et al*, 175
- Le Noc L, Trokiner A, Schneck J, Pougnet

- AM, Mellet R, Primot J, Savary H, ¹⁷O Knight shifts of the various types of CuO₂ planes in Bi-cuprates high-Tc superconductors, 387
- Leahy D, Morris J, Taylor P, Wait A, Real life proton donor and acceptor strengths: a new use for LSER, 1597
- Leblond J, Benkedda Y, Javelot S, Oger L, Studies of complex flows by nuclear magnetic resonance, 307
- Leclercq J — See Picard M *et al*, 583
- Leclercq JM — See Picard M *et al*, 583
- Lefèbvre F, Study of inorganic chlorides by solid-state chlorine-35 and chlorine-37 NMR*, 1767
- Lefèvre JF — See Koehl P *et al*, 135
- Lefrant S — ###, Godon C, Verdon T, Mulazzi E, Leising G, Optical properties of oriented polymers and co-polymers*, 947 — See Louarn G *et al*, 987 — See Makhlouki M *et al*, 1155 — See Quillard S *et al*, 1201 — See Bruschini C *et al*, 1227 — See Simon E *et al*, 1257 — See Athouël L *et al*, 1271 — See Athouël L *et al*, 1279 — See Athouël L *et al*, 1285 — See Nguyen TP *et al*, 1319
- Legendre B — See Mouani D *et al*, 2107
- Legoy MD — See Sarazin C *et al*, 541
- Legrand AP — See Taibi H *et al*, 445 — See Facchini L *et al*, 469 — See Tuel A *et al*, 477 — See Tougne P *et al*, 489 — See Tougne P *et al*, 497
- Leising G — See Lefrant S *et al*, 947
- Lelaurain M — See Saldi F *et al*, 997 — See Begin D *et al*, 1263
- Lere-Porte JP — See Peng XZ *et al*, 1085 — See Poussigues G *et al*, 1091
- Leroy-Willig A, Morvan D, Physico-chemical bases of contrast in NMR imaging*, 289
- Levert E — See Chao F *et al*, 1009
- Levi G — See Marsault JP *et al*, 1167
- Lincot D — See Youm I *et al*, 1105
- Livage J — See Gérardin C *et al*, 461
- Llauro-Darricades MF — See Hidalgo M *et al*, 505
- López DO — See Barrio M *et al*, 695
- Lopez S, Lancelot G, 2D NMR studies of a triple helix, 157
- Louarn G — ###, Mevellec JY, Buisson JP, Lefrant S, Experimental and theoretical study of vibrational properties of polythiophene, polymethylthiophene and polyoctylthiophene*, 987 — See Quillard S *et al*, 1201 — See Athouël L *et al*, 1271 — See Athouël L *et al*, 1279 — See Athouël L *et al*, 1285
- Loukianoff M — See Dubois JE *et al*, 1493
- Lucas B — See Belorgeot C *et al*, 1291

Ludwig M — See Pytela O *et al*, 1567

M

- Mahé E — See Aumelas A *et al*, 175
- Mahé L, Laszlo P, Sagnes O, Michel P, Dubois JC, Conducting polymers formed under steric control*, 1149
- Maire G — See Thiébaud JM *et al*, 1427
- Makhlouki M, Morsli M, Bonnet A, Conan A, Bernede JC, Lefrant S, Transport properties of conducting polymers composites: polyvinyl alcohol-polyppyrrrole*, 1155
- Malbe S, Mutin JC, Niepce JC, Cell parameter distributions in BaTiO₃ powders*, 825
- Malkov A, Belloni J, Reduction under radiation of divalent pyrolysis and combustion*, 885
- Man PP, Study of spin 3/2 system by a spin echo sequence (part 2), 335
- Mano V — See De Paoli MA *et al*, 1185
- Mansuy H, Gautier S, Palermo T, ³¹P NMR and IR spectroscopy study of interactions between anti-wear and dispersant additives, 525
- Marchand A — See Delalu H *et al*, 1413 — See Saugnac F *et al*, 1453
- Marchesiello M — See Genies E *et al*, 1161
- Marraud M — See Cung MT *et al*, 167
- Marsault JP, Fraoua K, Aeyach S, Aubard J, Levi G, Lacaze PC, *In situ* Raman structural study of polypyrrrole thin films prepared by electropolymerization on various substrates*, 1167
- Martin R — See Belmeliani A *et al*, 727
- Massiot D — See Taulelle F *et al*, 379
- Mathis C — See Reibel D *et al*, 1251
- Mauret P — See Alphonse P *et al*, 2029
- Mayer C — See Dufourc EJ *et al*, 243
- Medjram M — See Thiébaud JM *et al*, 1427
- Mekhalif Z — See Lang P *et al*, 1063
- Melikova SM — See Shchepkin DN *et al*, 607
- Mellet R — See Le Noc L *et al*, 387
- Mercier C — See Dubois JE *et al*, 1493
- Merle M — See Portais JC *et al*, 209
- Mevellec JY — See Louarn G *et al*, 987
- Michel P — See Mahé L *et al*, 1149
- Milijn D — See Müller P *et al*, 1639
- Milon A — See Krajewski-Bertrand MA *et al*, 237
- Mimouni M, Perrier S, Frihmat R, Hebrant M, Jeminet G, Pointud Y, Juillard J, Mode of action of calcimycin (A 23187). V. Its reaction with monovalent metal cations in a biphasic water-organic solvent sys-

- tem, 2169
Mincsovcics E — See Tuel A *et al*, 477
Minetti R — See Ribaucour M *et al*, 2127
Moliton A — See Athouël L *et al*, 1279 —
See Belorgeot C *et al*, 1291 — See
Ratier B *et al*, 1313 — See Ratier B *et al*,
1325
Moltion JP — See Ratier B *et al*, 1325
Montella C — See Diard JP *et al*, 2153
Morgantini PY, Fluekiger P, Weber J, Com-
puter modeling of the activation pro-
cesses of the aromatic nucleophilic
substitution mechanism, 1723
Morizur JP, Audier HE, Berthomieu D,
Chapon E, Provot G, Tortajada J,
Proton-bound complexes in
unimolecular decompositions of
substituted oxocarbenium ions, 1551
Morris J — See Leahy D *et al*, 1597
Morsli M — See Makhlouki M *et al*, 1155
Morvan D — See Leroy-Willig A *et al*, 289
Mory J — See Esnouf S *et al*, 1137
Mouani D, Souleau C, Legendre B, Phase
diagram of ternary system gold-
germanium-tin*, 2107
Moyen F — See Alphonse P *et al*, 2029
Mrabet B, Jouini M, Huet J, Lapluye G, Po-
tentiometric, calorimetric and spectro-
scopic study of copper(II) complexes
of leucine-enkephalin and tripeptides
containing tyrosine*, 2187
Mulazzi E — See Lefrant S *et al*, 947
Müller P, Milin D, Rationalization of strain
and steric effects by molecular
mechanics calculations, 1639
Muntasell J — See Barrio M *et al*, 695
Mura JL — See Guyot A *et al*, 745
Museux E — See Chao F *et al*, 1009
Musiani MM — See Deslouis C *et al*, 1193
Mutin JC — See Malbe S *et al*, 825

N

- Nakatani Y — See Krajewski-Bertrand MA *et al*, 237
Nguyen Cong H, Sene C, Chartier P,
Correlation between the physical
properties of poly(3-methyl-thiophene)
and the PMeT/CdS(A1)junction
characteristics*, 1071
Nguyen TP, Ettaik H, Lefrant S, Interface
effects in metal-polyparaphenylene-
metal structures*, 1319
Niepce JC — See Malbe S *et al*, 825
Notario R — See Abboud J *et al*, 1531

- Nuffer R — See Chiali S *et al*, 1233 — See
Reibel D *et al*, 1251
Nuñez-Vergara LJ — See Squella JA *et al*,
669

O

- Oger L — See Leblond J *et al*, 307
Ohga Y — See Takeushi K *et al*, 1631
Olinga T, François B, Soluble block and graft
polystyrene-polythiophene copolymers*,
1079
Olmedo L — See Jousse F *et al*, 1143
Oszczapowicz J, Similarity models in gas
chromatography, 1603
Ourisson G — See Krajewski-Bertrand MA
et al, 237

P

- Palermo T — See Mansuy H *et al*, 525
Papadouli I — See Cung MT *et al*, 167
Paun P — See Tomus EJ *et al*, 1487
Pechy P — See Dahn H *et al*, 1683
Pelous Y — See Athouël L *et al*, 1285
Pelton AD, The chemical capacitance - a
thermodynamic solution property,
1931
Pena O — See Conard J *et al*, 393
Peng XZ, Horowitz G, Garnier F, Poussigue
G, Benoit C, Sauvajol JL, Lere-Porte
JP, Chorro C, Effect of the insulator
on the characteristics of field effect
transistors based on alpha conjugated
sexithienyl*, 1085
Perdicakis M, Piatnicki C, Bessière J, Proton
reduction at a platinum
ultramicroelectrode: the effect of
supporting electrolyte on the limiting
current, 2067
Perez J — See Guyot A *et al*, 745
Perichaud A — See Bruschini C *et al*, 1227
— See Simon E *et al*, 1257
Perly B — See Aumelas A *et al*, 175 — See
Sizun P *et al*, 183
Perrier S — See Mimouni M *et al*, 2169
Perrin C — See Conard J *et al*, 393 — See
Simon D *et al*, 1993
Perrin D — See Belmeliani A *et al*, 727
Pétiaud R — See Hidalgo M *et al*, 505
Petit P, André JJ, Introduction to pulsed
ESR spectroscopy, 567
Piatnicki C — See Perdicakis M *et al*, 2067
Picard M, Quentin T, Leclercq J, Leclercq
JM, Finite element method *versus*
finite difference methods: theoretical
investigations of some models of
potential of biological interest, 583
Pichot C — See Guyot A *et al*, 745
Pierre JL — See Serratrice G *et al*, 549
Pigois-Landureau E — See Chehimi MM *et*

al, 1173

- Pith T — *See* Guyot A *et al*, 745
Planckaert B — *See* Capelle S *et al*, 561
Pointud Y — *See* Mimouni M *et al*, 2169
Portais JC, Merle M, Labouesse J, Canioni P,
Quantitative analysis of carbon-13 and
¹H NMR spectra: application to C6
glioma cell intermediary metabolism,
209
Pougnat AM — *See* Le Noc L *et al*, 387
Poussigie G — *See* El Machtani-Idrissi J *et al*,
1239
Poussigie G — *See* Peng XZ *et al*, 1085 —
###, Benoit C, Sauvajol JL, Lere-Porte
JP, Chorro C, A model for doped poly-
thiophene infrared and Raman
spectra*, 1091
Pregel MJ — *See* Buncel E *et al*, 1591
Primot J — *See* Le Noc L *et al*, 387
Proutière A — *See* Bamba SEH *et al*, 615
Provot G — *See* Morizur JP *et al*, 1551
Purdon JG — *See* Buncel E *et al*, 1591
Puzo G — *See* Rivière M *et al*, 199
Pytela O, Ludwig M, Substituent effects and
solvents, 1567

Q

- Quentin T — *See* Picard M *et al*, 583
Quillard S, Louarn G, Buisson JP, Lefrant S,
Vibrational analysis of reduced and
oxidized polyaniline*, 1201

R

- Rabaste F, Guyot G, Dauphin G, Jeminet G,
Delort AM, Monensin-induced modifica-
tions of ionic gradients on
Streptococcus faecalis. A ²³Na and
³¹P NMR study, 217
Raevsky OA, Grigor'ev VY, Kjireev NS, Ze-
firov NS, Correlation analysis and H-
bond ability in framework of QSAR,
1747
Rassat A — *See* Agafonov V *et al*, 1879
Ratier B — *See* Belorgeot C *et al*, 1291 —
###, Moliton A, Guille B, Froyer G,
Implantation temperature effect on
electrical properties of PPP*, 1313 —
###, Le Hue C, Moliton A, Moliton
JP, Froyer G, Gauneau M,
Displacement in PPP films of ion
implanted profiles by implantation
through a photoresist*, 1325
Rawiso M — *See* Widawski G *et al*, 1331
Reboul JP — *See* Cherifi A *et al*, 1337 —
See Gouton P *et al*, 1345
Reibel D, Nuffer R, Mathis C, Optimum con-

ditions for poly(phenylvinylsulfoxide)
to poly-acetylene) transformation*,
1251

- Renou JP — *See* Bonnet M *et al*, 227
Revel J — *See* Dagaud P *et al*, 1373
Ribaucour M, Minetti R, Carlier M, Sochet
LR, Autoignition at high pressure. De-
sign, construction and test of a rapid
compression machine*, 2127
Riess G — *See* Guyot A *et al*, 745
Riga J — *See* Rodrigue D *et al*, 1209
Rigole M — *See* Taouk B *et al*, 435
Rios L — *See* Guyot A *et al*, 745
Ríos MA — *See* Vásquez L *et al*, 595
Riou MT — *See* Athouel L *et al*, 1271 —
See Faid K *et al*, 1305
Rivière M, Puzo G, ¹H NMR study of
complex carbohydrates from a
mycobacterial glycopeptidolipidic anti-
gen, 199
Robin M — *See* Guittet E *et al*, 125
Roby C, Bligny R, Douce R, An NMR investi-
gation of vegetable cell*, 253
Rodrigue D, Riga J, Verbist JJ, Polyaniline
thermal stability: counter ion size
effect on electronic structure and
electrical conductivity*, 1209
Rouquerol F — *See* Bruschini C *et al*, 1227
Rousseau B — *See* Dosseh G *et al*, 533
Roussel JC, Chardaire-Rivière C, Use of high
magnetic fields in the visualisation of
porous media, 325
Roussy G — *See* Thiébaud JM *et al*, 1427
Rutledge DN, Low resolution pulse nuclear
magnetic resonance in the agro-food
industry, 273

S

- Sabry DY — *See* Guindy NM *et al*, 629
Sagnes O — *See* Mahé L *et al*, 1149
Salazar JM — *See* Sansfeld A *et al*, 799
Saldi F, Lelaurain M, Billaud D, Intercalation
of alkali metals (Na, K, Rb, Cs) into
highly oriented polyacetylene:
structural study of the different
phases*, 997
Salvi M — *See* Athouël L *et al*, 1279
Sanchez C — *See* Judenstein P *et al*, 1469
Sansfeld A, Steinchen A, Yazzourh S, Lalle-
mant M, Salazar JM, About adhesive
force between an oxide and its
metallic substrate: consequences on
the oxidation process*, 799
Sarazin C, Goethals G, Seguin JP, Legoy
MD, Barbontin JN, ¹H and ¹³C NMR
study of organic lipase-catalysed
synthesis of esters: influence of
water*, 541
Saugnac F, Teyssandier F, Marchand A,
Carbon-boron-nitrogen compounds

- obtained between 800 and 1000°C by low temperature chemical vapor deposition, 1453
- Sauvage JP — See Bidan G *et al*, 1045
- Sauvajol JL — ###, Djurado D, Dianoux AJ, Fischer JE, Lattice modes density in conjugated polymers: neutron incoherent scattering study*, 969 — See Peng XZ *et al*, 1085 — See Poussigue G *et al*, 1091 — See Ali Benamara A *et al*, 1245
- Savary H — See Le Noc L *et al*, 387
- Schmidt Y — See Bourbigot S *et al*, 1835
- Schneck J — See Le Noc L *et al*, 387
- Schott M — See Fave JL *et al*, 931
- Schuster R — See Schuster S *et al*, 1887
- Schuster S, Schuster R, Decomposition of biochemical reaction systems according to flux control insusceptibility, 1887
- Seguin JP — See Sarazin C *et al*, 541
- Seifried L — See Thiébaud JM *et al*, 1427
- Sene C — See Nguyen Cong H *et al*, 1071
- Sergent M — See Conard J *et al*, 393
- Serratrice G, Zeghli A, Beguin CG, Gellon G, Baret P, Pierre JL, ¹H NMR study of deprotonation and complexation of 2,2'-dihydroxybiphenyl derivatives, 549
- Shchepkin DN, Melikova SM, Theoretical vibrational study of hydrogen-bonded complexes: a simple anharmonic model, 607
- Siffert B — See Hamieh T *et al*, 1799
- Simon D, Perrin C, Atmospheric corrosion of nickel*, 1993
- Simon E, Perichaud A, Bernier P, Lefrant S, (CH)_x ex PVC functionalization: aromatic amine grafting*, 1257
- Simon F — See Spange S *et al*, 1615
- Simonet J — See Gache Y *et al*, 1027
- Siouffi AM — See Tuel A *et al*, 477
- Siove A — See Faid K *et al*, 1019 — See Athouel L *et al*, 1271 — See Faid K *et al*, 1305
- Sizaret PY — See Agafonov V *et al*, 1879
- Sizun P — See Aumelas A *et al*, 175 -- ###, Deleuze C, Bernassau JM, Perly B, Hydrogen-deuterium exchange as a tools to derive the secondary structure of (rHV2-Lys47) Hirudin*, 183
- Sochet LR — See Ribaucour M *et al*, 2127
- Souleau C — See Mouani D *et al*, 2107
- Spange S, Keutel D, Simon F, Approaches to empirical donor-receptor and polarity-parameters of polymers in solution and at interfaces, 1615
- Squella JA, Berguecia MA, Hernández A, Cassels BK, Nuñez-Vergara LJ, Electrochemical study of some 2,5-dimethoxyamphetamine derivatives, 669
- Srhiri A — See Laachach A *et al*, 2011
- Steinchen A — See Sansfeld A *et al*, 799
- Stohrer J — See Dufourc EJ *et al*, 243
- Straver L — See Agafonov V *et al*, 1879
- Szwarc H — See Agafonov V *et al*, 1879

T

- Taft RW, Perspectives on structural effects in organic chemistry, 1557
- Taibi H, Hommel H, Legrand AP, Study by NMR of ²⁹Si line profiles of amorphous silicas using dipolar dephasing*, 445
- Takeushi K, Ohga Y, Kitagawa T, A typical example of rate acceleration by F-strain in solvolysis, 1631
- Tamarit JL — See Barrio M *et al*, 695
- Tan Y — See Dagaud P *et al*, 1373
- Taouk B, Ghoussoub D, A Bennani D, Crusson E, Rigole M, Aboukais A, Decressain R, Fournier M, Guelton M, Characterization by ⁵¹V solid-state NMR of vanadium in dehydrated H₂PVMo₁₁O₄₀ and Na_{1,5}H_{2,5}PVMo₁₁O₄₀ catalysts, 435
- Tassi EL — See De Paoli MA *et al*, 1185
- Taulelle F — ###, Bessada C, Massiot D, Quantitative analysis in MAS NMR of quadrupolar nuclei, 379 — See Gérardin C *et al*, 461
- Taylor P — See Leahy D *et al*, 1597 — See Agafonov V *et al*, 1879
- Teisseire M — See Barrio M *et al*, 695
- Teyssandier F — See Sagnac F *et al*, 1453
- Thiébaud JM, Roussy G, Medjram M, Seifried L, Garin F, Maire G, Microwave reforming reactions on 0,2% Pt/Al₂O₃ catalyst*, 1427
- Tomus EJ, Guseila L, Paun P, Enthalpies of dilution of lithium nitrate aqueous concentrated solutions from 12 to 36°C*, 1487
- Tortajada J — See Morizur JP *et al*, 1551
- Tougne P — ###, Legrand AP, Unprotonated-protonated carbon ration in aromatic molecule determination using ¹³C-¹H dipolar dephasing*, 489 — ###, Legrand AP, Is it possible to observe quantitatively all the carbon atoms using magic angle spinning and cross polarisation into a weakly protonated molecules? The coronene matter*, 497
- Tourelle A — See Cherifi A *et al*, 1337 — See Gouton P *et al*, 1345
- Tran-Dinh S, Wietzerbin J, Hervé M, Mathematical model for the determination of metabolite fluxes in *Saccharomyces cerevisiae*, 65

- Tribollet B — See Deslouis C *et al*, 1193
Trokiner A — See Le Noc L *et al*, 387
Tsantili-Kakoulidou A, Kier LB, Joshi N, The use of electrotopological state indices in QSAR studies, 1729
Tsikaris V — See Cung MT *et al*, 167
Tuel A, Hommel H, Legrand AP, Gonnord MF, Mincsovcics E, Siouffi AM, Epoxy modified silicas for HPLC studied by ^{29}Si and ^{13}C solid-state NMR, 477
Tusar M, Zupan J, Gasteiger J, Neural networks and modelling in chemistry, 1493
Tzartos SJ — See Cung MT *et al*, 167

V

- van Heijenoort C — See Guittet E *et al*, 125
— See Bouaziz S *et al*, 147
van Truong Ng — See Buncel E *et al*, 1591
Vautrin M — See Andrieux CP *et al*, 1125
Vázquez L, Estévez CM, Ríos MA, Geometrical distortion caused by substituents. IV. Geometry and hybridization in pyridines, 595
Vedel J — See Youm I *et al*, 1105
Verbist JJ — See Rodrigue D *et al*, 1209
Verdon T — See Lefrant S *et al*, 947
Virlet J — ###, High resolution NMR in solid. Spins or sample motions. "MAS", "CRAMPS", "DAS", "DOR" some references*, 359 — ###, "Radiation damping". An important effect in ^1H or ^{19}F NMR in water, solvents and concentrated solutions*, 515
Voit J — See Foxonet N *et al*, 977

W

- Wait A — See Leahy D *et al*, 1597
Watson H — See Hidalgo M *et al*, 505
Weber J — See Morgantini PY *et al*, 1723
White RP — See Williams JH *et al*, 1755
Widawski G, Rawiso M, François B, Aggregation study of block copolymers polystyrene-polyparaphenylene by light and neutrons scattering*, 1331

- Wietzerbin J — See Tran-Dinh S *et al*, 65
Williams JH, White RP, Molecular motion in the van der Waals solid $\text{C}_6\text{H}_6:\text{C}_6\text{F}_6$, 1755
Wrobel G — See Bechara R *et al*, 853

X

- Xiao L — See Fan BT *et al*, 1911
Xu B — ###, Fichou D, Garnier F, Electrochemical oxidation studies of a series of thiophene oligomers in dilute solution*, 1097 — ###, Fichou D, Horowitz G, Garnier F, Charge carriers mobility enhancement by electrochemical inclusion of metallic ions in sexithiophene thin films*, 1117

Y

- Yazzourh S — See Sansfeld A *et al*, 799
Youm I — ###, Cadene M, Laplaze D, Lincot D, Vedel J, Photoelectrochemical study of poly(methyl-3-thiophene) non aqueous electrolyte junction*, 1105 — ###, Cadene M, Laplaze D, Photovoltaic properties of poly(methyl-3-thiophene) - CdZnS junctions*, 1111

Z

- Zahab A — See Agafonov V *et al*, 1879
Zaki AB — See El-Sheikh MY *et al*, 2057
Zalewski R, Structure-sweet taste relationship by discriminant and principal component analysis, 1507
Zanni H — See Fernandez L *et al*, 453
Zefirov NS — See Raevsky OA *et al*, 1747
Zeghli A — See Serratrice G *et al*, 549
Zhang S — See Bordwell FG *et al*, 1623
Zoppi RA — See De Paoli MA *et al*, 1185
Zupan J — See Tusar M *et al*, 1493
Zuppiroli L — See Esnouf S *et al*, 1137

Spins et porteurs de charge de polymères conducteurs inclus dans les cavités d'une zéolithe

S Esnouf¹, F Beuneu¹, J Mory¹, L Zuppiroliti¹, P Enzel², T Bein²

¹ *Laboratoire des Solides irradiés, École Polytechnique, 91128 Palaiseau Cedex, France;*

² *Department of Chemistry, University of New Mexico, Albuquerque, NM 87131, États-Unis*

Résumé

Nous avons introduit du polypyrrole, du polythiophène, de la polyaniline, ainsi que du polyacrylonitrile dans différentes zéolithes. La longueur des chaînes est supérieure à 10 monomères. Bien que les chaînes du polypyrrole soient pleinement oxydées par des ions Fe^{3+} et renferment des bipolarons mais aussi quelques polarons (environ 10^{-3} par monomère), elles ne révèlent pas de conductivité alternative notable. Les échantillons pyrolysés de zéolithe/polyacrylonitrile présentent un signal RPE complexe et une certaine conductivité hyperfréquence.

Summary

We are able to encapsulate polypyrrole, polythiophene, polyaniline or polyacrylonitrile within the channels of different zeolites with one- or three-dimensional topology. Optical absorption, ESR and a.c. conductivity (100 to 1000 MHz and 10 GHz) are used to characterize the samples. The chain length is found to be superior to 10 monomers. In the case of polypyrrole, although the chains are fully oxidized by intrazeolite Fe^{3+} ions and contain bipolaronic charge carriers as well as small concentrations of polarons (about 10^{-3} per monomer), they do not exhibit significant a.c. conductivity up to microwave frequencies. This observation as well as the relatively large linewidth of the ESR signal are believed to be due to trapping of polarons and bipolarons by the periodic zeolite framework. The pyrolyzed zeolite/polyacrylonitrile samples show up a complex ESR signal and some microwave conductivity.

Introduction

Le transport électronique dans les conducteurs organiques est en général fortement influencé par un couplage inter-chaîne même faible. Il est pour cette raison intéressant d'étudier les propriétés de chaînes de polymères ou d'oligomères quand ces couplages entre chaînes ont été artificiellement supprimés. Par ailleurs, la réalisation de chaînes de polymère conducteur isolées les unes des autres est liée au projet de fabriquer des composants

(†) Adresse actuelle : Institut de génie atomique, EPFL, CH-1015 Lausanne, Suisse

basés sur l'« électronique moléculaire ». Nous avons utilisé des zéolithes, matrices isolantes microporeuses, dans les cavités ou canaux desquelles sont synthétisés *in situ* différents polymères conducteurs : polypyrrole (1), polythiophène (2), polyaniline (3), polyacrylonitrile. Les charges et les spins portés par les chaînes ainsi réalisées sont étudiés par résonance paramagnétique électronique (RPE), par conductivité hyperfréquence (mesure des constantes diélectriques réelle et imaginaire) et par mesures optiques sur une large plage d'énergie (200 à 2600 nm).

Échantillons

Les zéolithes sont des aluminosilicates, naturels ou artificiels, qui présentent une importante microporosité. Nous avons utilisé au cours de ce travail deux types de zéolithes : la faujasite ou zéolithe Y, qui renferme un réseau (de structure cubique diamant) de cavités de 1,2 nm de diamètre reliées entre elles par des pores de 0,75 nm d'ouverture, et d'autre part la mordénite, qui contient des canaux unidimensionnels parallèles de 0,7 nm de diamètre.

Des études électrochimiques (4) de la polymérisation du pyrrole ont montré que pour obtenir du polypyrrole sous sa forme pleinement oxydée, on doit capturer en moyenne 2,3 électrons par monomère : dans cette oxydation, deux électrons servent à la polymérisation tandis que les 0,3 restants créent des porteurs de charge sous forme de polarons possédant un spin ou de bipolarons sans spin. Dans ces conditions, la fabrication des échantillons débute par l'introduction dans la zéolithe d'ions oxydants Fe^{3+} par échange d'ions en phase aqueuse suivi d'une oxydation : 10 Fe^{3+} /maille pour la zéolithe Y et 2,5 Fe^{3+} /maille pour la mordénite. Après déshydratation (à 400°C sous 10^{-5} torr), on introduit le pyrrole en solution dans l'hexane à l'abri de l'air. La polymérisation se produit alors et est terminée au bout d'une heure environ à 25°C ; comme l'adsorption du monomère est bien plus rapide que la polymérisation, une accumulation du polymère à la surface des grains de zéolithe, qui ont de l'ordre de 1 μm de diamètre, est peu probable.

Nous avons également étudié d'autres polymères conducteurs synthétisés d'une manière analogue : polythiophène, polyaniline ; de plus, nous avons récemment commencé à travailler sur le polyacrylonitrile pyrolysé.

A partir de la poudre de zéolithe ainsi chargée en polymère, on réalise des échantillons pour la RPE dans des tubes en silice scellés, pour les mesures radio-fréquence par mélange avec de la paraffine et moulage en forme de cylindre, et enfin pour les mesures optiques en utilisant un spectromètre UV-visible équipé d'une sphère d'intégration. On a de plus réalisé un tube de RPE spécial, dans lequel le pyrrole a pu être mis en contact avec la poudre de zéolithe pendant l'expérience de RPE. Les spectres RPE sont obtenus sur un spectromètre Bruker ER200D équipé d'un cryostat Oxford ESR900 (de 4 à 300 K) et d'une acquisition sur micro-ordinateur. Les mesures HF sont réalisées sur l'analyseur d'impédances HP 4191A (de 100 à 1000 MHz) ; quelques résultats sont obtenus sur les tubes de RPE introduits dans une cavité résonnante multimode (8 à 14 GHz) pilotée par l'analyseur de réseaux HP 8510C. Les mesures d'optique sont effectuées sur Hitachi U4001.

Résultats

1) polypyrrole

Les données optiques (1) montrent que les chaînes de polymère obtenues ont la même réponse en réflectance que le polymère massif. La présence de chaînes longues dans nos zéolithes est par ailleurs confirmée par la nature insoluble des polymères récupérés après dissolution de la matrice de zéolithe (HF ou acide citrique).

Les spectres RPE montrent deux raies : l'une, à $g \simeq 2,003$, est associée au polymère tandis que l'autre, à $g = 4,28$, correspond à la réponse classique des ions Fe^{3+} dans un champ cristallin non cubique (5). La première raie, relativement fine et intense, a une forme intermédiaire entre lorentzienne et gaussienne, et la seconde, bien plus large, a une forme complexe. Les deux signaux semblent correspondre à des spins sans interaction puisqu'ils suivent une simple loi de Curie jusqu'à 4,2 K.

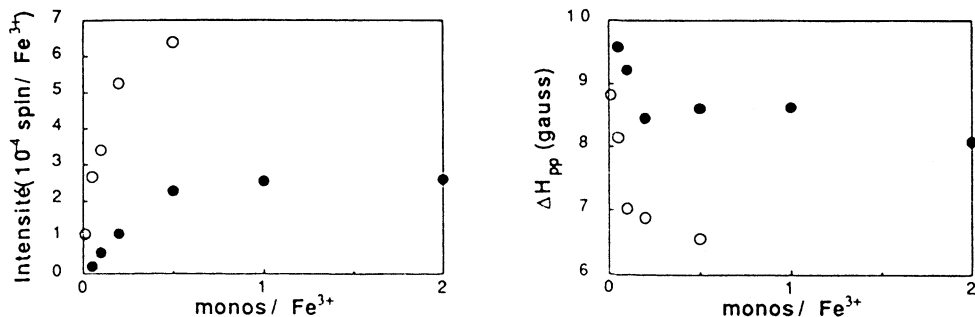


Figure 1. Intensité et largeur de raie du signal de polypyrrole à 300 K en fonction de la concentration en monomère. o : zéolithe Y ; ● : mordenite.

On donne figure 1 l'allure de la variation de l'intensité et de la largeur de la raie du polymère avec la concentration en monomère ; cette concentration est exprimée ici en monomères par ion Fe^{3+} . On voit qu'indépendamment de la topologie des cavités de la zéolithe le nombre de spins est proportionnel à la concentration en monomère, et ce jusqu'à une concentration qui correspond à peu près à 2 ions oxydants par monomère. Au delà de cette concentration, le nombre de spins ne varie plus. Ceci signifie que jusqu'à cette concentration la polymérisation est complète, et qu'ensuite, conformément à la stoechiométrie 1 : 2,3, pratiquement tous les ions Fe^{3+} ont été « consommés » dans la réaction de polymérisation. La partie linéaire de la courbe d'intensité permet de donner un nombre de spins par monomère : $2,6 \times 10^{-3}$ spin/monomère dans la zéolithe Y et $1,4 \times 10^{-3}$ spin/monomère dans la mordenite. Notons que ces valeurs sont remarquablement faibles si on les compare aux valeurs obtenues dans le polypyrrole massif (4) et semblent indiquer un état très oxydé du polymère (quasi-absence de polarons). Les largeurs de raie du signal de polymère sont environ 10 fois plus fortes que celles observées dans le polymère massif, et subissent le même effet de saturation que l'intensité. Avec la température, entre 4 K et 300 K, l'intensité du signal suit une loi de Curie ; sa largeur diminue quand la température augmente (typiquement : de 16 gauss à 4 K à 7 gauss à 300 K).

Nous avons effectué la polymérisation *in situ* dans la zéolithe Y de polypyrrole au cours d'une expérience de RPE. Les résultats sont donnés figure 2 : le nombre de spins augmente avec le temps, puis se sature et décroît lentement, tandis que la largeur de raie décroît depuis le début de l'expérience.

Si notre analyse en termes de chaînes relativement longues (plus de 10 monomères) complètement oxydées est exacte, on peut espérer que les chaînes vont révéler une conductivité électrique comparable à celle de polymère massif. Pour vérifier cela, nous avons étudié l'absorption haute fréquence (de 100 à 1000 MHz) de la poudre de zéolithe enrobée de

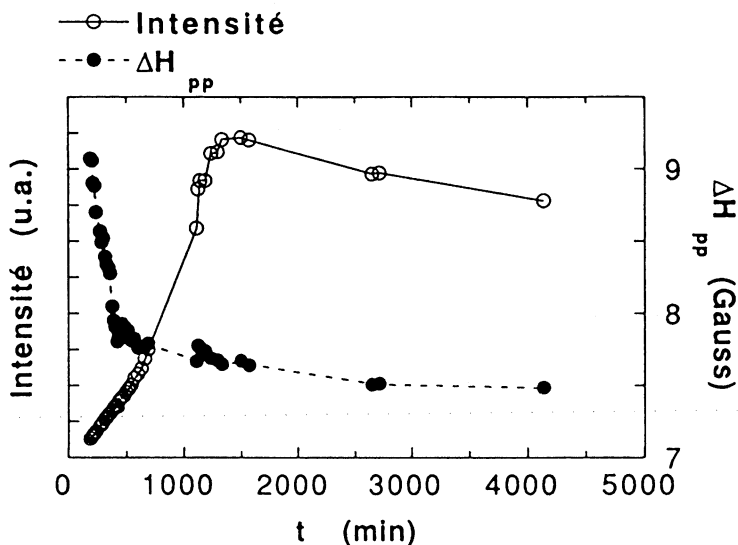


Figure 2. Intensité et largeur de raie du signal de polypyrrole à 300 K dans la zéolithe Y en fonction du temps de polymérisation. o : intensité ; • : largeur de raie.

paraffine. La présence de paraffine impose une déconvolution des mesures de constante diélectrique selon la formule de Maxwell-Garnett (6). Compte tenu de barres d'erreur de 20 % sur les résultats, les parties réelle (ϵ') et imaginaire (ϵ'') de la constante diélectrique ne varient pas avec la fréquence. On donne figure 3 des valeurs représentatives prises à 500 MHz en fonction de la concentration en monomère, en comparant des échantillons oxydés par des ions Fe^{3+} à des témoins non polymérisés à base d'ions Fe^{2+} . Si l'on considère que la différence entre les valeurs de ϵ'' pour le polymère (Fe^{3+}) et pour le monomère (Fe^{2+}) sont à attribuer à la conductivité de la chaîne de polymère, on déduit une limite supérieure de conductivité

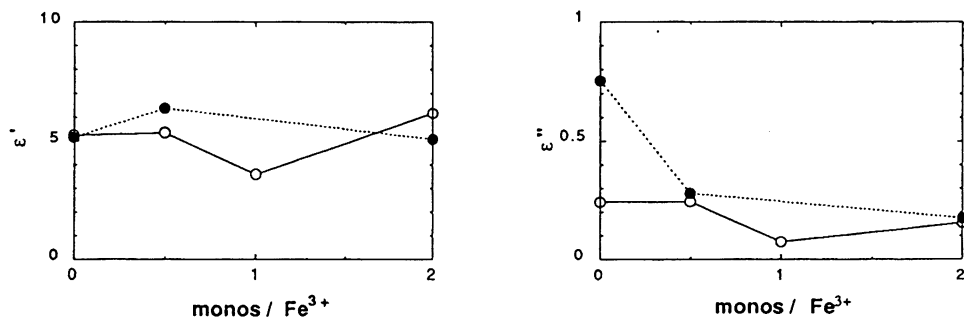


Figure 3. Parties réelle (ϵ') et imaginaire (ϵ'') de la constante diélectrique à 500 MHz en fonction de la concentration en monomère, dans la zéolithe Y ; o : non polymérisé (ion Fe^{2+}) ; • : polymérisé (ion Fe^{3+}).

particulièrement basse, de l'ordre de $\sigma = 5 \times 10^{-6} (\Omega.cm)^{-1}$. Des mesures d'absorption effectuées en hyperfréquence (8 à 14 GHz) sur les tubes de RPE montrent de même une contribution très faible du polymère à la conductivité. Il semble difficile d'imaginer que cette valeur très faible soit due aux barrières existant aux ruptures de chaînes, car dans ce cas on devrait obtenir une importante augmentation de la partie réelle ϵ' , ce qui n'est pas le cas. On doit plutôt penser que l'absence de conduction observée provient du fait que polarons et bipolarons sont piégés par les ions de la structure ; ce piégeage expliquerait les importantes largeurs de raie RPE décrites plus haut.

2) polythiophène et polyaniline

Nous avons observé dans le cas de ces deux polymères conducteurs un comportement analogue à celui du polypyrrole : un signal de polymère relativement large, correspondant typiquement à 10^{-3} spin par monomère. Le point intéressant pour le polythiophène réside dans la comparaison possible avec les résultats du travail de Caspar *et al.* (7), qui ont étudié en optique et en RPE les oligomères 6 et 9 du thiophène dans les cavités d'une zéolithe. Nos propres données, tant en optique qu'en RPE, sont comparables aux spectres larges obtenus pour le polymère massif et non pas aux spectres bien résolus de Caspar *et al.*, ce qui nous mène à la conclusion que nos chaînes de polymère ont une longueur notablement supérieure à 10 monomères.

3) polyacrylonitrile pyrolysé

Le polyacrylonitrile est un polymère dont le motif élémentaire s'écrit $—CH_2—CHCN—$. Il a la propriété de devenir semi-conducteur si on le pyrolyse (8) ou si on l'irradie aux ions (9). Ses propriétés de photoconductivité ont fait l'objet de nombreux travaux. Comme pour les polymères cités plus haut, nous avons étudié des inclusions du polyacrylonitrile dans la zéolithe Y, mais aussi dans la mordénite et la silicalite. La préparation des échantillons

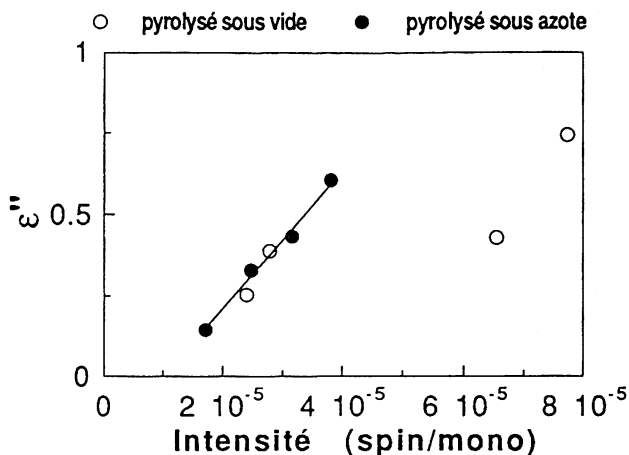


Figure 4. Partie imaginaire (ϵ'') de la constante diélectrique à 8 GHz en fonction de l'intensité RPE de polyacrylonitrile pyrolysé dans la zéolithe Y ; ○ : pyrolysé sous vide ; ● : pyrolysé sous azote.

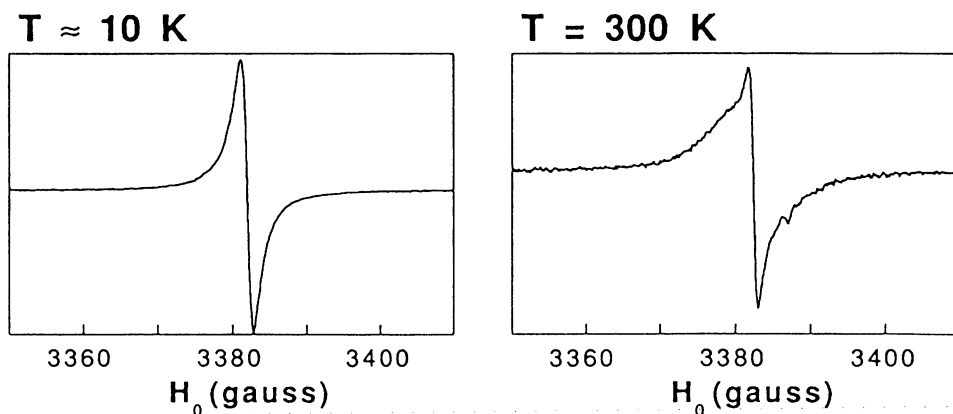


Figure 5. Signal RPE à 10 K et à 300 K de polyacrylonitrile pyrolysé à 650°C et pendant 12 heures sous vide, dans la zéolithe Y.

nécessite dans un premier temps la polymérisation des monomères d'acrylonitrile dans la zéolithe, puis la pyrolyse du système ainsi formé. Les expériences effectuées comportent, sur les mêmes tubes et à 300 K, des spectres de RPE et des mesures diélectriques en hyperfréquence. Nous donnons figure 4 les résultats dans le cas de la zéolithe Y, qui montrent une corrélation manifeste entre l'intensité de la raie RPE et la partie imaginaire ϵ'' de la constante diélectrique à 8 GHz. Nous faisons varier les conditions de pyrolyse (sa température : 650 et 700°C, sa durée : 12 et 24 heures, sous vide ou sous azote). Plus cette pyrolyse est énergique, plus l'intensité RPE et la valeur de ϵ'' sont importants. Nous remarquons que les échantillons pyrolysés à 650°C et pendant 12 heures possèdent un signal de RPE complexe que nous interprétons comme la superposition de deux raies ($g \approx 2,0029$ et $2,0032$) dont la forme est proche d'une courbe de Lorentz. Le signal le plus étroit disparaît si on augmente la durée ou la température de pyrolyse. Si la forme du signal évolue avec la température (figure 5), l'intensité totale suit une loi de Curie. Des expériences complémentaires sont en cours pour tenter de préciser le comportement de ce polymère.

Références

- (1) T. Bein et P. Enzel, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1989**, 28, 1692-1694 ; T. Bein, P. Enzel, F. Beuneu et L. Zuppiroli, *Adv. Chem. Ser.* **1990**, 26, 433-449
- (2) P. Enzel et T. Bein, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* **1989**, 1326-1327
- (3) P. Enzel et T. Bein, *J. Phys. Chem.* **1989**, 93 6270-6272
- (4) M. Nechtschein, F. Devreux, F. Genoud, E. Vieil, J.M. Pernaut et E. Genies, *Synth. Metals* **1986**, 15, 59-78
- (5) T. Castner, G.S. Newell, W.C. Holton et C.P. Slichter, *J. Chem. Phys.* **1960**, 32, 668-673
- (6) R. Landauer, dans *Electrical transport and optical properties in inhomogeneous media*, American institute of physics, Conf. Proceedings 40, éditeur J.C. Garland **1978**, 2-44
- (7) J.V. Caspar, V. Ramamurthy et D.R. Corbin, *J. Am. Chem. Soc.* **1991**, 113, 600-610
- (8) A.H. Bhuiyan et S.V. Bhoraskar, *Thin Solid Films* **1988**, 162, 333-342
- (9) B. Wasserman, M.S. Dresselhaus, G. Braunstein, G.E. Wnek et G. Roth, *J. Elect. Mat.* **1985**, 14, 157-170