



# 1,4-Bis(carboxylatoethynyl)bicyclo[2.2.2]octane : un rotor ultra-rapide dans un cristal de sel dilué est freiné au sein d'un métal multifonctionnel

Submitted by Cécile Mézière on Thu, 05/21/2015 - 15:07

Titre	1,4-Bis(carboxylatoethynyl)bicyclo[2.2.2]octane : un rotor ultra-rapide dans un cristal de sel dilué est freiné au sein d'un métal multifonctionnel
Type de publication	Communication
Type	Communication par affiche dans un congrès
Année	2011
Langue	Français
Date du colloque	06-08/06/2011
Titre du colloque	Journées scientifiques de la SCF, section Bretagne-Pays de la Loire
Auteur	Mézière, Cécile [1], Lemouchi, Cyprien [2], Batail, Patrick [3]
Pays	France
Ville	Ile de Noirmoutier
Mots-clés	Crystal structure [4], Electric Conductivity [5], Electric insulators [6], Hydrogen bond [7], Molecular dynamics [8], Molecular Structure [9]

1,4-Bis(carboxylatoéthynyl)bicyclo[2.2.2]octane : un rotor ultra-rapide dans un sel dilué est freiné au sein d'un métal multifonctionnel<sup>1</sup>

L'objectif de ce travail est la conception de systèmes dans lesquels les propriétés dynamiques d'une machine moléculaire seraient corrélées aux propriétés électroniques que l'on rencontre habituellement dans les matériaux conçus au laboratoire par la technique d'électrocristallisation. Pour cela un sel dilué de formulation  $[nBu_4N^+]_2[BABCO][BABCO^-]_2$  a été préparé à partir du 1,4-di(éthynyl)bicyclo[2.2.2]octane synthétisé en neuf étapes<sup>2</sup>. Des expériences de temps de relaxation spin-réseau du <sup>1</sup>H sur cristal statique montrent que deux environnements différents des rotors sont associés à des énergies d'activation et des fréquences de rotation différentes.

Ce sel a été engagé dans un processus d'électrocristallisation avec le donneur d'électrons de type  $\pi$  EDT-TTF-CONH<sub>2</sub> pour donner un nouveau métal organique cristallin : (EDT-TTF-CONH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>[BABCO<sup>-</sup>], pour la première fois avec une fonctionnalité dynamique. Une seule position d'équilibre est observée pour le rotor dont on observe que l'énergie d'activation est grandement augmentée : ceci pourrait être attribué à des contraintes à la rotation accrues, expression d'un réseau dense d'interactions non covalentes (liaisons hydrogènes et interactions dihydrogène attractives<sup>3</sup>).

Ce matériau organique métallique ouvre la voie à d'autres systèmes multifonctionnels amphidynamiques.

<sup>1</sup>C. Lemouchi, C. Mézière, L. Zorina, E. Canadell, P. Wzietek, P. Auban-Senzier, C. Pasquier, P. Batail, soumis

<sup>2</sup>C. Lemouchi, C. Vogelsberg, S. Simonov, L. Zorina, P. Batail, S. Brown, M. A. Garcia-Garibay, J. Am. Chem. Soc., 133, 6371-6379 (2011).

<sup>3</sup>J. Echeverria, G. Aullon, D. Danovich, S. Shaik, S. Alvarez, Nature Chem., 2011, DOI: 10.1038/nchem.1004

Résumé en français

URL de la notice

<http://okina.univ-angers.fr/publications/ua11733> [10]

---

## Liens

[1] <http://okina.univ-angers.fr/cecile.meziere/publications>

[2] [http://okina.univ-angers.fr/publications?f\[author\]=3934](http://okina.univ-angers.fr/publications?f[author]=3934)

[3] <http://okina.univ-angers.fr/patrick.batail/publications>

[4] [http://okina.univ-angers.fr/publications?f\[keyword\]=4795](http://okina.univ-angers.fr/publications?f[keyword]=4795)

[5] [http://okina.univ-angers.fr/publications?f\[keyword\]=11719](http://okina.univ-angers.fr/publications?f[keyword]=11719)

[6] [http://okina.univ-angers.fr/publications?f\[keyword\]=17668](http://okina.univ-angers.fr/publications?f[keyword]=17668)

[7] [http://okina.univ-angers.fr/publications?f\[keyword\]=17669](http://okina.univ-angers.fr/publications?f[keyword]=17669)

[8] [http://okina.univ-angers.fr/publications?f\[keyword\]=9621](http://okina.univ-angers.fr/publications?f[keyword]=9621)

[9] [http://okina.univ-angers.fr/publications?f\[keyword\]=8358](http://okina.univ-angers.fr/publications?f[keyword]=8358)

[10] <http://okina.univ-angers.fr/publications/ua11733>

Publié sur *Okina* (<http://okina.univ-angers.fr>)