

- Caractérisation par « photo-RMN » de composés photo-commutables

Un deuxième axe de recherche concerne l'étude de systèmes photo-actifs. Les changements de structure moléculaire induits par irradiation lumineuse peuvent conférer aux matériaux des propriétés exceptionnelles comme les changements de couleur (photochromisme), la conversion d'énergie lumineuse en énergie chimique, ou l'activation de processus chimiques complexes. La compréhension des interactions entre les photo-commutateurs et leur environnement (solvants ou matrice poreuse) représente ainsi une étape clé vers la conception de matériaux fonctionnels avancés.

Nous avons ainsi développés un dispositif permettant de générer des états photo-induits dans des solides à l'extérieur du spectromètre et de transférer l'échantillon à basse température dans le spectromètre RMN. En complétant les études RMN par des études photo-cristallographiques *in-situ* de l'équipe CRISP du laboratoire, nous pouvons étudier les effet de la structure moléculaire sur la génération et la relaxation thermique d'états photo-induits (e.g. complexes nitrosyl).

Les calculs DFT viennent également compléter ces études en donnant accès à la distribution de la densité de charge entre les atomes. En plus de permettre l'attribution des signaux RMN, ces calculs permettent également l'attribution des spectres IR afin d'identifier les espèces photo-induite dans des expériences de photo-IR *in-situ*.

Afin d'étudier également le photochromisme et le solvatochromisme de photocommutateurs en solution, nous avons développé un dispositif pour l'irradiation *in-situ* en solution que nous appliquons à l'étude de photocommutateurs (e.g. cyclocurcumine, spyropirananes, ...). Dans ces études, la RMN permet d'observer la réversibilité de la photoisomérisation au cours de cycles d'irradiation successifs et d'identifier les produits de photo-dégradation. Le suivi *in-situ* permet également d'étudier les cinétiques et les rendement quantiques de photo-isomérisation.

