
Sur l'interaction entre composés organiques de mercure et nucléobases: Une étude expérimentale et théorique

M. Merced Montero-Campillo*^{†1}, L. Latrous², Manuel Yáñez³, V. Haldys⁴, Jean-Claude Guillemin⁵, Jean-Yves Salpin^{‡4}, and E. León⁴

¹Universidad Autonoma de Madrid (UAM) – Espagne

²Faculté des Sciences de Tunis – Tunisie

³Universidad Autonoma de Madrid – Espagne

⁴Université d'Evry Val d'Essonne – – – France

⁵Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Rennes – – – France

Résumé

Le mercure est une des métaux les plus toxiques et aussi très persistant dans la chaîne trophique, ainsi que ses formes organométalliques RHg^+ (R =groupement alkyle). Ces cations sont capables d'interagir avec plusieurs structures biologiques supramoléculaires. Ils démontrent une haute affinité pour l'ADN et en particulier par les résidus de thymine. La structure des adduites entre les ions RHg^+ et les bases d'AND et encore à déterminer et les études en phase gaz, en combinant techniques expérimentales (Mass Spectrometry (MS) et InfraRed Multiple Photon Dissociation (IRMPD)) avec des calculs DFT, peuvent aider la dessus.

Dû à l'interaction entre les ions RHg^+ et les nucléobases d'uracile, thymine et cytosine, les complexes $[\text{RHgU}]^+$, $[\text{RHgT}]^+$ et $[\text{RHgC}]^+$ sont générés abondamment. Ensuite, une réaction de transfert du groupement alkyle du cation vers la nucléobase, avec élimination de Hg^0 a lieu. La structure moléculaire des possibles fragments formés pendant la réaction a été calculée avec DFT pour déterminer la stabilité relative et comparer les données IR théoriques avec les résultats IRMPD. La fonctionnelle et la base ont été choisies après une étude approfondie de plusieurs fonctionnelles et leur description des données spectroscopiques des composés de mercure alkylés. Les structures ont été complètement optimisées au niveau B3LYP/6-311+G(d,p)/DEF2-TVZPPD et après recalculées leur géométrie fixe au niveau B3LYP/6-311+G(3df,2pd)/DEF2-QZVPD. Nous nous proposons de montrer les résultats de cette comparaison pour identifier la nature des fragments créés.

Anichina, J.; Dobrusin, Z.; Bohme, D. K. J. Phys. Chem. B **2010**, 114, 15106. [2] Salpin, J. Y.; Guillaumont, S.; Tortajada, J.; MacAleese, L.; Lemaire, J.; Maitre, P. ChemPhysChem **2007**, 8, 2235 [3] Montero-Campillo MM. ; Lamsabhi A. ; Mo O. ; Yanez M. Theor. Chem. Acc. **2013**, 132, 1328.

*Intervenant

[†]Auteur correspondant: mm.montero@uam.es

[‡]Auteur correspondant: jean-yves.salpin@univ-evry.fr

Mots-Clés: Mercure, nucléobases, DFT, IRMPD