

SLOW PHOTOELECTRON SPECTROSCOPY OF 3-HYDROXYISOQUINOLINE

Yi Pan and Kai-Chung Lau

Department of Biology and Chemistry, City University of Hong Kong, Kowloon, Hong Kong

Lionel Poisson

CNRS, IRAMIS, SPAM, Laboratoire Francis Perrin, URA 2453, F-91191 Gif-sur-Yvette,
France.

CEA, IRAMIS, SPAM, Laboratoire Francis Perrin, URA 2453, F-91191 Gif-sur-Yvette,
France.

Gustavo A. Garcia and Laurent Nahon

Synchrotron SOLEIL, L'orme des Merisiers, Saint-Aubin - BP 48 - 91192 Gif-sur-Yvette
Cedex, France.

Majdi Hochlaf * ^{a)}

Université Paris-Est, Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle, MSME UMR
8208 CNRS, 5 bd Descartes, 77454 Marne-la-Vallée, France.

Full List of co-authors for Refs. 4, 9, 10, 13, and 36:

- (4) Hendricks, R. T.; Spencer, S. R.; Blake, J. F.; Fell, J. B.; Fischer, J. P.; Stengel, P. J.; Leveque, V. J. P.; Lepogam, S.; Rajyaguru, S.; Najera, I.; Josey, J. A.; Swallow, S. '3-Hydroxyisoquinolines as inhibitors of HCV NS5b RNA-dependent RNA polymerase'. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2009**, *19*, 410–414.
- (9) Pouilly, J. C.; Schermann, J. P.; Nieuwjaer, N.; Lecomte, F.; Grégoire, G.; Desfrancois, C.; Garcia, G. A.; Nahon, L.; Nandi, D.; Poisson, L.; Hochlaf, M. 'Photoionization of 2-pyridone and 2-hydroxypyridine'. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2010**, *12*, 3566–3572.
- (10) Mahjoub, A.; Hochlaf, M.; Poisson, L.; Nieuwjaer, N.; Lecomte, F.; Schermann, J. P.; Grégoire, G.; Manil, B.; Garcia G. A.; Nahon, L. 'Slow Photoelectron Spectroscopy of δ -Valerolactam and Its Dimer'. *ChemPhysChem* **2011**, *12*, 1822–1832.
- (13) Gaussian 09, Revision A.02, Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Mennucci, B.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Caricato, M.; Li, X.; Hratchian, H. P.; Izmaylov, A. F.; Bloino, J.; Zheng, G.; Sonnenberg, J. L.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Montgomery, Jr., J. A.; Peralta, J. E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M.; Heyd, J. J.; Brothers, E.; Kudin, K. N.; Staroverov, V. N.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A.; Burant, J. C.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Rega, N.; Millam, N. J.; Klene, M.; Knox, J. E.; Cross, J. B.; Bakken, V.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R. E.; Yazyev, O.; Austin, A. J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J. W.; Martin, R. L.; Morokuma, K.; Zakrzewski, V. G.; Voth, G. A.; Salvador, P.; Dannenberg, J. J.; Dapprich, S.; Daniels, A. D.; Farkas, Ö.; Foresman, J. B.; Ortiz, J. V.; Cioslowski, J.; Fox, D. J. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
- (36) Werner, H.-J.; Knowles, P. J.; Knizia, G.; Manby, F. R.; Schütz, M.; Celani, P.; Korona, T.; Lindh, R.; Mitrushenkov, A.; Rauhut, G.; Shamashundar, K. R.; Adler, T. B.; Amos, R. D.; Bernhardsson, A.; Berning, A.; Cooper, D. L.; Deegan, M. J. O.; Dobbyn, A. J.; Eckert, F.; Goll, E.; Hampel, C.; Hesselmann, A.; Hetzer, G.; Hrenar, T.; Jansen, G.; Köppl, C.; Liu, Y.; Lloyd, A. W.; Mata, R. A.; May, A. J.; McNicholas, S. J.; Meyer, W.; Mura, M. E.; Nicklass, A.; O'Neill, D. P.; Palmieri, P.; Peng, D.; Pflüger, K.; Pitzer, R.; Reiher,

M.; Shiozaki, T.; Stoll, H.; Stone, A. J.; Tarroni, R.; Thorsteinsson, T.; and Wang,

M. MOLPRO is a package of ab initio programs, see <http://www.molpro.net>.