



Spectroscopie laser de paires d'ions isolées et microsolvatées

Spécialité Chimie-physique

Niveau d'étude Bac+5

Formation Master 2

Unité d'accueil [LIDYL/LUMO-SBM](#)

Candidature avant le 12/04/2019

Durée 6 mois

Poursuite possible en thèse oui

Contact [GLOAGUEN Eric](#)

+33 1 69 08 35 82

eric.gloaguen@cea.fr

Résumé

Ce stage porte sur la caractérisation par spectroscopie laser IR et UV de paires d'ions moléculaires isolées et microsolvatées. L'objectif est de décrire l'effet d'un contre-ion sur le repliement d'un ion moléculaire, et de caractériser l'organisation locale du solvant autour des ions appariés.

Sujet détaillé

Les paires d'ions sont des objets supramoléculaires omniprésents dans la Nature, depuis l'eau de mer et les aérosols, jusqu'aux organismes vivants. Ces ions appariés constituent les toutes premières étapes de la cristallisation des espèces ioniques, influencent les propriétés des solutions concentrées en ions ou des liquides ioniques, et jouent ainsi un rôle majeur dans d'innombrables applications. Bien qu'étant rencontrées dans de nombreux domaines de la Physique, la Chimie ou la Biologie, leur caractérisation est rendue compliquée par la coexistence de plusieurs types de paires ainsi que par leur nature transitoire en solution. La phase gazeuse présente, en revanche, l'avantage de pouvoir examiner individuellement ces paires d'ions à l'échelle de l'atome par des études de spectroscopie IR et UV. Cette approche, combinée à des calculs de chimie quantique, permet de caractériser la structure de paires d'ions moléculaires flexibles, et d'analyser les interactions non covalentes qui gouvernent leur forme [1].

Le sujet du stage porte sur l'étude de plusieurs systèmes modèles qui permettra d'estimer l'effet du contre-ion sur le repliement d'un ion moléculaire et de décrire l'organisation locale du solvant autour des ions appariés. Le projet principal sera expérimental et permettra de maîtriser un ensemble varié d'équipements (lasers OPO IR, laser à colorant UV, spectromètre de masse à temps de vol, jet moléculaire) et de techniques (désorption laser, spectroscopie double résonance IR/UV, formation des systèmes isolés complexes en phase gazeuse). Le stage permettra également d'aborder le volet théorique de l'étude, donnant ainsi à l'étudiant une vision d'ensemble d'un projet scientifique où expériences et calculs de chimie quantique se complètent.

<http://iramis.cea.fr/LIDyL/>

<http://iramis.cea.fr/Pisp/70/eric.gloaguen.html>

[1] Habka, S.; Brenner, V.; Mons, M.; Gloaguen, E. Journal of Physical Chemistry Letters 2016, 7, 1192.

Mots clés

Physico-Chimie Moléculaire

Compétences

Spectroscopie Laser - Spectrométrie de masse - Désorption laser - Jets moléculaires - Chimie quantique - Champs de forces polarisables

Logiciels

Turbomole, Tinker, Labview

Laser spectroscopy of isolated and microsolvated ion pairs

Summary

This project aims at studying isolated and microsolvated molecular ion pairs by IR and UV spectroscopy. Several model systems will be investigated to unravel the effect of a counterion on the folding of a molecular ion, and characterize the local organization of the solvent molecules around the paired ions.

Full description

Ion pairs are ubiquitous supramolecular objects in Nature, from sea water and aerosols, to living organisms. These paired ions are the very first step of crystallisation of ionic species, they influence the properties of ion-concentrated solutions or ionic liquids, and play a key role in countless applications. Although they are met in many areas of Physics, Chemistry and Biology, their characterisation is complicated by the co-existence of several types of pairs and their elusive nature in solution. Gas phase studies, however, can investigate neutral ion pairs at the atomic scale by IR and UV laser spectroscopy. Combined to quantum chemistry calculations, this approach can characterize the structure of flexible molecular ion pairs, and analyse the main non-covalent interactions that control their shape [1].

This project aims at studying the effect of a counterion on the folding of a molecular ion, and at describing the local organization of the solvent molecules around the paired ions for a few model systems. The main work will be experimental, and will enable the master student to gain experience on a set of various instruments (OPO lasers, dye lasers, mass spectrometer, molecular beam) and techniques (laser desorption, IR/UV double resonance spectroscopy, formation of complex systems in the gas phase). This project will also address theoretical aspects, giving to the student an overview of a scientific project where quantum chemistry calculations and laser spectroscopy complement each.

<http://iramis.cea.fr/LIDyL/>

<http://iramis.cea.fr/Pisp/70/eric.gloaguen.html>

[1] Habka, S.; Brenner, V.; Mons, M.; Gloaguen, E. Journal of Physical Chemistry Letters 2016, 7, 1192.

Keywords

Molecular Physical-Chemistry

Skills

Laser Spectroscopy - Mass spectrometry - Laser Desorption - Molecular Beams - Quantum Chemistry - Polarizable Force Field

Softwares

Turbomole, Tinker, Labview