



Spectroscopie et dynamique de molécules hébergées dans des gouttelettes d'hélium

Spécialité Physique moléculaire

Niveau d'étude Bac+5

Formation Master 2

Unité d'accueil [LIDYL/LUMO-DyR](#)

Candidature avant le 10/04/2019

Durée 4 mois

Poursuite possible en thèse oui

Contact [BRIANT Marc](#)

+33 1 69 08 81 21

marc.briant@cea.fr

Résumé

L'objectif est d'identifier et de comprendre les processus fondamentaux qui accompagnent l'absorption de lumière par des molécules ou des assemblages moléculaires hébergés dans des gouttelettes d'hélium. Ces études sont orientées pour décrypter les aspects physicochimiques très fondamentaux qui interviennent dans la définition de la structure et la dynamique de systèmes comportant de très nombreux degrés de liberté.

Sujet détaillé

Le stage portera sur des problématiques fondamentales en physico-chimie moléculaire avec pour objectif d'identifier les différents conformères de molécules possédant de nombreux degrés de liberté (les molécules biologiques souvent flexibles, par exemple) ainsi que l'influence de l'environnement sur ces conformères. Le travail, essentiellement expérimental, consistera à utiliser des gouttelettes d'hélium superfluide comme support pour réaliser la spectroscopie de la molécule ou de complexes moléculaires dont nous voulons étudier la structure.

En pratique, les gouttelettes d'hélium sont générées par nucléation lors de la détente supersonique d'hélium gazeux refroidi. Jouer sur les conditions de détente permet d'ajuster la taille des gouttelettes. Le faisceau traverse ensuite plusieurs zones de piégeage collisionnel ce qui permet de déposer dans les gouttelettes, les molécules étudiées ainsi que des molécules de solvant. Une technique développée dans notre laboratoire permet un contrôle strict du nombre de molécules déposées. La stœchiométrie de l'assemblage moléculaire étudié dans ces gouttelettes est donc bien définie. La spectroscopie est réalisée par l'absorption de lumière de longueur d'onde appropriée par la molécule étudiée. La molécule ainsi excitée relaxe ensuite son énergie à l'agrégat d'hélium, le fragilisant et conduisant à l'évaporation de ce dernier. Mesurer la disparition des gouttelettes en fonction de la longueur d'onde du laser d'excitation permet alors de mesurer le spectre d'absorption de la molécule ou du système moléculaire hébergé dans la gouttelette. De tels spectres apportent une information structurale importante. Ces expériences pourront être conduites sur plusieurs dispositifs expérimentaux existants.

Mots clés

Physique-chimie, spectroscopie moléculaire, laser, spectrométrie de masse, jet supersonique, cryogénie

Compétences

Spectroscopie moléculaire Laser Spectrométrie de masse

Logiciels

C, Python, Word, Excel

Spectroscopy and Dynamics of Molecules Embedded in Helium Nanodroplets

Summary

The objective of this internship is to identify and understand the fundamental processes that are turned on when a molecule (or a molecular assembly) absorbs light within a helium nanodroplet. These studies are motivated by fundamental physical chemistry considerations on the structure and dynamics of systems with many degrees of freedom.

Full description

The internship will focus on fundamental issues in molecular physical chemistry with the aim of unraveling the conformer landscape of molecules with many degrees of freedom (biological molecules often flexible, for example) as well as the influence of the environment on these conformers. The work, essentially experimental, will consist of using superfluid helium droplets as a support to carry out the spectroscopy of the molecule or molecular complexes of which we want to study the structure.

In practice, the helium droplets are generated by nucleation during the supersonic expansion of cooled helium gas. Playing on the conditions of expansion allows to adjust the size of the droplets. The beam then passes through several collisional trapping zones, which allows the molecules studied to be deposited in the droplets, as well as the solvent molecules. A technique developed in our laboratory allows a strict control of the number of deposited molecules. The stoichiometry of the molecular assembly studied in these droplets is therefore well defined. The spectroscopy is performed by the absorption of light of appropriate wavelength by the molecule or molecular complex studied. The molecule thus excited then relaxes its energy to the helium droplet, weakening it and leading to the evaporation of the droplet. Measuring the disappearance of the droplets as a function of the wavelength of the excitation laser then makes it possible to measure the absorption spectrum of the molecule or the molecular complex hosted in the droplet. Such spectra provide important structural information. These experiments can be conducted on several existing experimental devices.

Keywords

Physical-chemistry, molecular spectroscopy, laser, mass spectrometry, supersonic beam, cryogenics

Skills

Molecular spectroscopy Laser Mass spectrometry

Softwares

C, Python, Word, Excel