

## Dynamique vibrationnelle en solide cryogénique résolue en temps à l'échelle femtoseconde

**Responsables du stage** : Claudine Crépin et Wutharath Chin

**Laboratoire** : Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay UMR 8214

**Adresse** : ISMO Bât. 350-210, CNRS – Université Paris-Sud, 91405 Orsay

**Téléphone** : 01 69 15 75 08 - 01 69 15 75 39

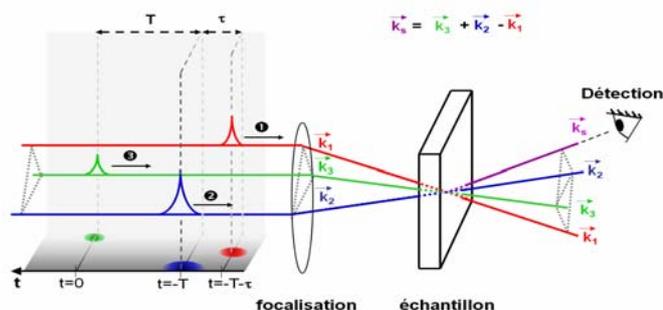
**Courriel** : [claudine.crepin-gilbert@u-psud.fr](mailto:claudine.crepin-gilbert@u-psud.fr), [wutharath.chin@u-psud.fr](mailto:wutharath.chin@u-psud.fr)

### Sujet proposé :

La dynamique des modes de vibration permet d'explorer les surfaces de potentiel d'édifices moléculaires complexes : elle conduit à une étude fine des interactions entre une molécule et le milieu qui l'entoure ou entre différents vibreurs. En particulier, l'analyse de la **cohérence vibrationnelle** donne accès à une grande variété d'interactions, à la fois statiques et dynamiques, liées directement aux processus essentiels de solvatation, de réactivité chimique ou de fonctionnalité. Notre groupe étudie des systèmes moléculaires isolés dans des solides inerts à basse température afin de réduire le nombre de processus mis en jeu pour *in fine* extraire les informations essentielles à la compréhension de ces processus.

L'analyse de la dynamique moléculaire du système est réalisée par des expériences de **mélange à quatre ondes infra-rouge, résolues en temps**, de type **échos de photons**, à l'échelle femto-seconde. Ces techniques, analogues optiques des techniques de RMN, sont très performantes puisqu'elles ont le potentiel unique de pouvoir fournir des informations structurales et dynamiques.

*Figure : Séquence d'impulsions conduisant à la formation du signal d'écho de photons :  $\tau$ , temps de « cohérence », que l'on fait varier pour l'étude des déphasages,  $T$ , temps d'« attente », paramètre essentiel dans l'étude des populations vibrationnelles.*



Lors du stage, le problème de la « fluxionalité » moléculaire (passage d'un mode de vibration à l'autre par modification dynamique de la structure moléculaire) sera abordé au travers de l'étude de  $\text{Fe}(\text{CO})_5$  piégé dans divers solides. Cette fluxionalité semble avoir été observée en solution [1], mais nos premiers résultats en matrice permettent de donner une nouvelle interprétation [2]. L'influence du solide hôte sera particulièrement analysée.

Le stagiaire sera aussi amené à effectuer des études de spectroscopie IR d'absorption des échantillons afin de caractériser au préalable les systèmes.

### Références :

[1] J.F. Cahoon et al. *Science*, vol.319, p 1820 (2008).

[2] R. Thon, *Thèse de l'Université Paris-Sud* (2013), <http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00842721/>