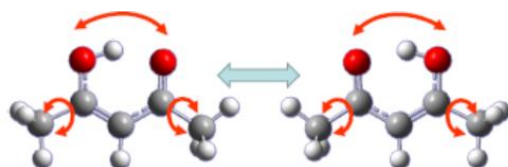


Sujet de stage Master

Flexibilité des molécules dans l'environnement quantique du parahydrogène solide

Les mouvements moléculaires de grande amplitude et la façon dont ils sont couplés jouent un rôle essentiel dans les problématiques liées à la relation structure - flexibilité - fonctionnalité/réactivité des molécules. Nous voulons en particulier caractériser le rôle de ces couplages dans des systèmes modèles à liaison hydrogène (liaison H) où le transfert d'hydrogène par effet tunnel est un des mouvements de grande amplitude.

Nous isolons des molécules dans un solide de para-hydrogène pour pouvoir étudier leurs vibrations et leur flexibilité dans des conditions expérimentales simplifiées. Le para-hydrogène (pH₂) forme à basse température (3 K) un solide très peu perturbant pour les espèces piégées. Ce solide (dit quantique à cause du mouvement important de H₂ à « 0 K ») bloque partiellement les mouvements de rotation des molécules mais reste suffisamment « mou » pour permettre les mouvements de grande amplitude liés à leur flexibilité. Le dispositif que nous avons monté à l'ISMO pour réaliser des matrices de pH₂ est unique en France. Les objets étudiés seront des molécules méthylées et/ou présentant une liaison H intramoléculaire afin d'explorer ces deux types de mouvements de grande amplitude : la torsion des méthyles (CH₃) et/ou le transfert d'hydrogène, ainsi que leurs éventuels couplages dans des molécules spécifiques telles que l'acétylacétone (voir figure).



Couplage entre torsions des méthyles et transfert de H dans l'acétylacétone.

Nos premiers résultats [1-4] ont montré l'intérêt et l'originalité des travaux dans le para-hydrogène. Le stage approfondira l'analyse des mouvements moléculaires et leur perturbation par le solide quantique sur des familles de molécules modèles.

L'étude est principalement basée sur la spectroscopie infrarouge des systèmes moléculaires. Elle peut être complétée par de la spectroscopie électronique sous excitation laser des molécules.

Outils méthodologiques : spectroscopie infrarouge, techniques d'isolation en matrice cryogénique, spectroscopie laser, outils de programmation et d'analyse.

[1] R. R. Lozada García et al., Angewandte Chemie, 51, 6947 (2012) [2] A. Gutiérrez Quintanilla et al, Faraday Discussions, 212, 499 (2018) [3] A. Gutiérrez Quintanilla et al., Phys Chem Chem Phys, 20, 28658 (2020) [4] A. I. Strom et al. J. Chem Phys. A, 124, 4471 (2020).

L'étudiant.e pourra candidater à un financement de l'école doctorale pour la poursuite en thèse.