

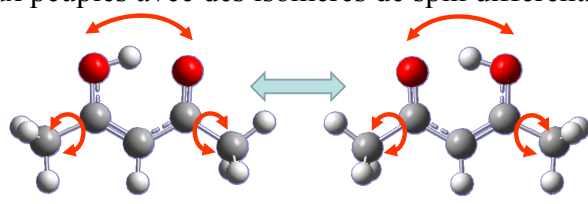
Spécialité de Master « Optique, Matière, Paris »

Stage de recherche (4 mois minimum, à partir de début mars)

Proposition de stage

Date de la proposition : 24/10/2017

Responsable du stage / internship supervisor:			
Nom / name:	CREPIN	Prénom/ first name :	Claudine
Tél :	01 69 15 75 39	Fax :	01 69 15 67 76
Courriel / mail:	claudine.crepin-gilbert@u-psud.fr		
Nom du Laboratoire / laboratory name: Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay (ISMO)			
Code d'identification :	UMR8214	Organisme :	CNRS/Université Paris Sud
Site Internet / web site:	www.ismo.u-psud.fr		
Adresse / address:	rue André Rivière, Bât. 520, Université Paris-Sud, F-91405 Orsay, France		
Lieu du stage / internship place:	Bâtiment 520, Université Paris Sud, Université Paris Saclay		

Titre du stage / internship title: Mouvements de grande amplitude et effet tunnel en matrice de <i>para</i>-hydrogène
Résumé / summary La flexibilité des molécules est une propriété importante liée à leur réactivité chimique. 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 des molécules. Les objets étudiés seront de petites molécules méthylées présentant ou non une liaison hydrogène intramoléculaire pour analyser l'influence du couplage de deux mouvements de grande amplitude : la torsion des méthyles (CH ₃) et le transfert d'hydrogène le long de la liaison hydrogène. Les systèmes moléculaires seront piégés dans le <i>para</i>-hydrogène (<i>p</i> H ₂) solide à 3 K et caractérisés par spectroscopies IR et UV/visible. Le solide de <i>p</i> H ₂ forme une matrice cryogénique « quantique », très peu perturbante pour les molécules piégées : elle bloque partiellement les mouvements de rotation des molécules mais reste suffisamment « molle » pour permettre les mouvements de grande amplitude. Nous avons mis au point une méthode expérimentale originale pour examiner les couplages entre torsion de groupes méthyles et transfert d'hydrogène dans ce solide particulier au cours de l'étude de l'acétylacétone [R. R. Lozada García et al., <i>Angewandte Chemie</i> , 51 , 6947–6950 (2012)]. Cette technique fait appel à la détection de la relaxation de spin nucléaire dans les groupements CH ₃ où les niveaux de torsion sont dédoublés par effet tunnel donnant des sous-niveaux peuplés avec des isomères de spin différents.
 <p>Couplage entre torsions des méthyles et transfert de H dans l'acétylacétone</p>
Le stage portera sur la caractérisation de petites molécules méthylées comme le propyne (CH ₃ -C≡CH) en matrice de <i>p</i> H ₂ afin de comprendre et d'analyser l'influence du solide sur les mouvements de rotation et de torsion. Certains dérivés méthylés du benzène présentant une liaison hydrogène intramoléculaire seront également étudiés afin d'aborder le couplage entre torsion des méthyles et transfert d'hydrogène. Le stage permettra à l'étudiant de se familiariser avec les techniques du vide, de la cryogénie, de la spectroscopie moléculaire. Les expériences pourront être complétées par des calculs théoriques de structure moléculaire et des modélisations d'effet tunnel.

Ce stage pourra-t-il se prolonger en thèse ? Possibility of a PhD ? : oui			
Si oui, financement de thèse envisagé/ financial support for the PhD: allocation du ministère			
Lumière, Matière, Interactions	X	Lasers, Optique, Matière	X

Fiche à transmettre (fichier pdf **obligatoirement**) sur le site <http://stages.master-omp.fr>