

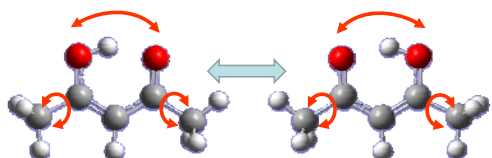
Spécialité de Master « Optique, Matière, Paris »

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

Proposition de stage

Date de la proposition : 18/10/2018

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 : UMR 8214		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 EN MATRICE DE PARAHYDROGÈNE
Résumé / summary
<p>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 \leftrightarrow flexibilité \leftrightarrow fonctionnalité/réactivité des molécules. Nous isolons les molécules dans un solide de <i>para</i>-hydrogène pour pouvoir étudier leurs vibrations et leur flexibilité dans des conditions expérimentales simplifiées. Le <i>para</i>-hydrogène forme à très basse température (3 K) un solide très peu perturbant pour les espèces piégées : ce solide bloque partiellement les mouvements de rotation des molécules mais reste suffisamment « mou » pour permettre les mouvements de grande amplitude.</p> <p>Les objets étudiés seront des molécules méthylées présentant ou non une liaison hydrogène intramoléculaire pour étudier 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 (liaison H). Ils seront caractérisés par spectroscopies IR et UV/visible.</p> <p>Nous avons mis au point récemment une méthode expérimentale très 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'acétylacétone¹ ouvrant des perspectives à explorer sur la dynamique de dérivés de l'acétylacétone ou de certains dérivés benzéniques méthylés. 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. L'intrication entre transfert d'hydrogène et rotation du méthyle donne des propriétés particulières à ces sortes de machines moléculaires.</p>
 <p>Couplage entre torsions des méthyles et transfert de H dans l'acétylacétone</p>
<p>Les études dans des matrices plus classiques telles que les matrices de gaz rare ou les matrices d'azote seront également nécessaires. La nature du milieu hôte peut avoir une influence déterminante sur les mouvements de grande amplitude : certains peuvent être bloqués par simple interaction de van der Waals avec l'environnement². Les systèmes présentant des liaisons H pourront d'autre part être soumis à des irradiations UV en matrice afin de piéger des formes isomères dans lesquelles les liaisons H sont rompues : nous aurons ainsi accès à des systèmes très similaires aux systèmes piégés initialement, mais présentant des couplages entre mouvements de grande amplitude très différents.</p> <p>Le stage permettra à l'étudiant(e) de se familiariser avec les techniques du vide, la cryogénie, la spectroscopie infrarouge par transformée de Fourier, la spectroscopie laser. Les expériences pourront être complétées par des calculs théoriques de structure moléculaire et des modélisations d'effet tunnel.</p>
<p>[1] R. R. Lozada García et al., <i>Angewandte Chemie</i>, 51, 6947–6950 (2012) ; A. Gutiérrez Quintanilla et al., <i>Faraday Discussions</i>, DOI: 10.1039/c8fd00080h (2018)</p> <p>[2] A. Gutiérrez-Quintanilla, Thèse de l'Université Paris Saclay (2016) ; A. Gutiérrez Quintanilla et al., <i>PCCP</i>, 20, 12888 (2018)</p>

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: bourse de l'école doctorale			
Lumière, Matière, Interactions	X	Lasers, Optique, Matière	X