



Proposition de stage de M2 - 2021

Groupe « Agrégats » du LCAR (Université de Toulouse III/CNRS UMR 5589)

Sébastien Zamith, Jean-Marc L'Hermite et Christine Joblin

Propriétés des PAH nano-solvatés

Directeur de stage: Sébastien Zamith

Contacts : sebas@irsamc.ups-tlse.fr ☎ : 05 61 55 83 56

Le groupe Agrégats du LCAR en collaboration avec l'équipe MICMAC de l'IRAP (C. Joblin) a entamé l'étude de molécules d'hydrocarbures aromatiques polycycliques (PAH) d'intérêt astrophysique. Des missions spatiales récentes (notamment le télescope Spitzer), ont permis de montrer que ces PAH sont une composante importante des régions de formation stellaire. Les PAH sont relâchées en phase gazeuse par destruction de nanograins carbonés sous l'effet des photons ultraviolets issus des étoiles jeunes massives. Les agrégats de PAH sont des premiers modèles pour ces nanograins mais des espèces plus complexes comme des agrégats mixtes PAH-eau doivent également être considérées.

Deux dispositifs expérimentaux sont dédiés à ces études. L'un d'eux, opérationnel, permet d'étudier la nucléation, la fragmentation et la transition solide-liquide dans les agrégats moléculaires. Ce dispositif expérimental, basé sur la spectrométrie de masse par temps de vol et la manipulation électrostatique d'espèces chargées, permet de caractériser la probabilité de collage d'atomes ou de molécules uniques sur des agrégats sélectionnés en taille [1]. Il donne également accès aux transitions de phase dans les agrégats [2] et permet de caractériser leur fragmentation [3].

Le second dispositif, PIRENEA 2, permet de manipuler et de piéger des espèces chargées à l'aide de guide d'ions vers une cellule ICR [4]. Une fois piégée en environnement cryogénique, les espèces peuvent par exemple être irradiées par des photons UV.

Suivant l'état d'avancement du projet, ce stage exploitera l'un ou l'autre des dispositifs expérimentaux. Plus précisément, le stage portera sur la production contrôlée d'agrégats de PAH purs et PAH-eau et leur caractérisation par spectrométrie de masse. A partir de là, plusieurs études pourront être envisagées :

- Etude de la stabilité des agrégats mixte PAH-eau : détermination par des mesures de sections efficaces induites par collision des énergies de liaison.
- Etude de la fragmentation induite par collisions de PAH solvatés dans des agrégats d'eau. Il s'agit de caractériser l'effet de l'environnement aqueux sur la dynamique de fragmentation des PAH.
- Etude de l'attachement de molécules d'eau sur les PAH.
- Production et piégeage des agrégats mixtes PAH-eau sur PIRENEA 2.

L'étudiant participera durant son stage aux travaux expérimentaux (optimisation et exploitation du montage expérimental, acquisition et analyse de données). Il sera initié aux techniques expérimentales de jet moléculaire et de manipulation électrostatique, de guidage et de piégeage de nanoparticules chargées. Il participera à l'acquisition des données mais aussi à leur analyse théorique.

Le stage pourra se poursuivre par une thèse utilisant le nouveau dispositif PIRENEA 2 du projet Nanocosmos afin d'étudier les processus de photo-désorption impliquant ces mêmes agrégats moléculaires dans des conditions proches de celles des régions de formation stellaire.

- [1] “Attachment of Water and Alcohol Molecules onto Water and Alcohol Clusters”, I. Braud, J. Boulon, S. Zamith, and J.-M. L’Hermite, *J. Phys. Chem. A* **119**, 6017–6023 (2015)
- [2] “Experimental nanocalorimetry of protonated and deprotonated water clusters”, J. Boulon, I. Braud, S. Zamith, P. Labastie, and J.-M. L’Hermite, *J. Chem. Phys.* **140**, 164305 (2014)
- [3] “Threshold collision induced dissociation of pyrene cluster cations”, S. Zamith, J.-M. L’Hermite, L. Dontot, L. Zheng, M. Rapacioli, F. Spiegelman and C. Joblin *J. Chem. Phys.* **153**, 054311 (2020)
- [4] “PIRENEA 2: A new setup to study cosmic dust in the laboratory”,
<https://nanocosmos.iff.csic.es/technology/pirenea-2-pirenea-and-espoirs-upgrades/>