



Proposition de stage de M2

Groupe « Agrégats » du LCAR (Université de Toulouse III/CNRS UMR 5589)
Sébastien Zamith, Alexandre Marciniak, Jean-Marc L'Hermite et Christine Joblin

Etude expérimentale des agrégats eau-hydrocarbures aromatiques polycycliques d'intérêt astrophysique

Directeur de stage: Sébastien Zamith

Contacts : sebastien.zamith@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 (HAP) d'intérêt astrophysique. Des missions spatiales récentes (notamment le télescope James Webb), ont permis de montrer que ces HAP sont une composante importante des régions de formation stellaire. Les HAP sont relâchées en phase gazeuse par destruction de nanograins carbonés sous l'effet des photons ultraviolets issus des étoiles jeunes massives. Les agrégats de HAP sont des premiers modèles pour ces nanograins mais des espèces plus complexes comme des agrégats mixtes HAP-eau doivent également être considérées.

Le dispositif expérimental dédié à ces études permet d'étudier la nucléation, la fragmentation et la transition solide-liquide dans les agrégats moléculaires. Les espèces d'intérêt sont formées dans une source à agrégation gazeuse cryogénique. Cette source permet de former des agrégats de type $(\text{Pyrène})_m(\text{H}_2\text{O})_n\text{H}^+$. Des techniques de spectrométrie de masse par temps de vol et de manipulation électrostatique d'espèces chargées permettent alors de sélectionner en masse ces agrégats afin de les étudier par collision. Il est possible par exemple de caractériser la probabilité de collage d'atomes ou de molécules uniques sur les agrégats sélectionnés en taille [1], d'avoir accès aux transitions de phase dans les agrégats [2] et de caractériser leur fragmentation [3].

Plus précisément, le stage portera sur la production contrôlée d'agrégats de pyrène ou de ses dérivés (méthylpyrène, hydroxypyrene) complexés avec de l'eau et leur caractérisation par spectrométrie de masse. A partir de là, plusieurs études pourront être envisagées :

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

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.

[1] "Water Attachment onto Size-Selected Cationic Pyrene Clusters", S. Zamith, A. Kassem, J.-M. L'Hermite, and C. Joblin, *J. Phys. Chem. A* **126**, 3696–3707 (2022)

[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] "Diversity of protonated mixed pyrene-water clusters investigated by collision induced dissociation", A. M. Nair, H. Leboucher, L. Toucouere, S. Zamith, C. Joblin, J.-M. L'Hermite, A. Marciniak and A. Simon, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26**, 5947-5961 (2024)