



*Propriétés moléculaires étudiées dans des  
environnements macroscopiques*

4-6 nov. 2025 Orsay (France)

**cnrs** **GDR EMiE** Groupement  
de recherche  
**E**difices **M**oléculaires **i**solés et **E**nvironnés





## Programme

### mardi 4 novembre 2025

---

| HEURES | ÉVÉNEMENT |
|--------|-----------|
|--------|-----------|

|               |                                                                                                                                            |
|---------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 14:00 - 14:15 | Accueil - Ouverture                                                                                                                        |
| 14:15 - 14:45 | Jets liquides sous vide et leurs possibles applications en physico-chimie moléculaire. - Christophe Nicolas                                |
| 14:45 - 15:15 | Différents usages de la spectroscopie d'électrons en phase liquide. - Remy Dupuy                                                           |
| 15:15 - 15:45 | Pause café / Posters                                                                                                                       |
| 15:45 - 16:15 | Simulation de la radiolyse de l'eau et de petite biomolécules solvatées par dynamique moléculaire ab initio. - Marie-Anne Hervé du Penhoat |
| 16:15 - 16:45 | Capture électronique interatomique dans des cations solvatés. - Nicolas Sisourat                                                           |
| 16:45 - 17:15 | Caractérisation de la structure supramoléculaire en solution par spectroscopie FZRET en microjet liquide. - Eric Gloaguen                  |
| 17:45 - 18:30 | Posters                                                                                                                                    |

### mercredi 5 novembre 2025

---

| HEURES | ÉVÉNEMENT |
|--------|-----------|
|--------|-----------|

|               |                                                                                                                                                                                             |
|---------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 09:30 - 10:00 | Modélisation de propriétés structurales et spectroscopiques de systèmes complexes: des champs de forces dérivés de la chimie quantique aux potentiels machine learning. - Carine Clavaguera |
| 10:00 - 10:30 | Simulations de la réactivité chimique dans des aérosols aqueux. - Damien Laage                                                                                                              |
| 10:30 - 11:00 | Pause café / Posters                                                                                                                                                                        |
| 11:00 - 11:30 | Dynamique électronique attoseconde en phase liquide. - Hugo Marroux                                                                                                                         |
| 11:30 - 12:00 | Désorption laser de gouttelettes liquides - Nicolas Nieuwjaer                                                                                                                               |
| 12:00 - 14:00 | Déjeuner / Posters                                                                                                                                                                          |
| 14:00 - 14:30 | Analogues de glaces interstellaires irradiées par des photons. - Géraldine Ferraud                                                                                                          |
| 14:30 - 15:00 | Particules uniques en lévitation : techniques, couplage avec des méthodes d'analyse et exemples d'applications. - Sophie Sobanska                                                           |
| 15:00 - 15:30 | Pause café / Posters                                                                                                                                                                        |
| 15:30 - 17:30 | Table ronde                                                                                                                                                                                 |
| 17:30 - 18:30 | Posters                                                                                                                                                                                     |

### jeudi 6 novembre 2025

---

| HEURES | ÉVÉNEMENT |
|--------|-----------|
|--------|-----------|

|               |                                                           |
|---------------|-----------------------------------------------------------|
| 09:00 - 12:00 | Visite de Soleil et Attolab - Visite de Soleil et Attolab |
|---------------|-----------------------------------------------------------|





## Liste des participants

| FIRSTNAME   | LASTNAME         | MAIL                                               |
|-------------|------------------|----------------------------------------------------|
| Manal       | Al Sahmarani     | manal98sahmrani@gmail.com                          |
| Ayoub       | Badri            | ayoub.badri@univ-paris13.fr                        |
| jean-xavier | BARDAUD          | jean-xavier.bardaud@universite-paris-saclay.fr     |
| Romain      | Basalgète        | romain.basalgete@gmail.com                         |
| Marc        | Briant           | marc.briant@cea.fr                                 |
| michel      | Broquier         | michel.broquier@universite-paris-saclay.fr         |
| Matthias    | Büchner          | matthias.buchner@irsamc.ups-tlse.fr                |
| Pierre      | Carcabal         | pierre.carcabal@cnrs.fr                            |
| Wutharath   | Chin             | wutharath.chin@cnrs.fr                             |
| Carine      | Clavaguéra       | carine.clavaguera@universite-paris-saclay.fr       |
| Stéphane    | Coussan          | stephane.coussan@univ-amu.fr                       |
| Emmanuel    | DARTOIS          | emmanuel.dartois@universite-paris-saclay.fr        |
| Charles     | Desfrancois      | charles.desfrancois@univ-paris13.fr                |
| Rémi        | Dupuy            | remi.dupuy@sorbonne-universite.fr                  |
| Géraldine   | Féraud           | geraldine.feraud@upmc.fr                           |
| ERIC        | GLOAGUEN         | eric.gloaguen@universite-paris-saclay.fr           |
| Gildas      | Goldsztejn       | gildas.goldsztejn@universite-paris-saclay.fr       |
| Marie-Anne  | Hervé du Penhoat | marie-anne.herve_du_penhoat@sorbonne-universite.fr |
| M.          | Hochlaf          | majdi.hochlaf@univ-eiffel.fr                       |
| Loic        | Journel          | loic.journel@sorbonne-universite.fr                |
| Arsène      | Kossov           | arsene.kossov@gmail.com                            |
| Damien      | Laage            | damien.laage@ens.fr                                |
| Marie       | Labeye           | marie.labeye@ens.psl.eu                            |
| Alper       | Lacin            | alper.lacin@outlook.fr                             |
| Léo         | LAVY             | leo.lavy@gmail.com                                 |
| Alberto     | Macario Farto    | alberto.macariofarto@sorbonne-paris-nord.fr        |
| hugo        | marroux          | hugo.marroux@cea.fr                                |
| Xavier      | Michaut          | xavier.michaut@sorbonne-universite.fr              |
| Laurent     | Nahon            | laurent.nahon@synchrotron-soleil.fr                |
| christophe  | NICOLAS          | christophe.nicolas@synchrotron-soleil.fr           |
| Nicolas     | Nieuwjaer        | nicolas.nieuwjaer@univ-paris13.fr                  |
| Simone      | Pezzotti         | simone.pezzotti@ens.psl.eu                         |
| Lionel      | Poisson          | lionel.poisson@universite-paris-saclay.fr          |
| Audrey      | Scognamiglio     | audrey.scognamiglio@universite-paris-saclay.fr     |
| Debora      | Scuderi          | debora.scuderi@u-psud.fr                           |
| Niloufar    | Shafizadeh       | niloufar.shafizadeh@universite-paris-saclay.fr     |
| Nicolas     | Sisourat         | Nicolas.Sisourat@upmc.fr                           |
| Sophie      | Sobanska         | sophie.sobanska@u-bordeaux.fr                      |
| Delfina     | Toulouse         | delfina.toulouse@sorbonne-universite.fr            |
| Anne        | Zehnacker        | anne.zehnacker-rentien@universite-paris-saclay.fr  |





## Présentations Orales



---

# Jet liquide sous vide : un outil de choix pour l'étude des propriétés physico-chimiques des solutions, et plus encore.

Christophe Nicolas<sup>\*1</sup>

<sup>1</sup>Synchrotron SOLEIL (SSOLEIL) – INRA – L'Orme des Merisiers Saint-Aubin - BP 48 91192  
GIF-sur-YVETTE CEDEX, France

## Résumé

La physico-chimie des solutions présente des caractéristiques uniques qui la distinguent des phases gazeuse et solide, notamment en ce qui concerne la dynamique des mouvements des molécules constituant le liquide. Par exemple, la mobilité des ions en solution joue un rôle crucial dans la spécificité des solutions électrolytes dans différents domaines scientifiques allant de la chimie à la biologie. Dans le cadre des sciences de l'environnement, il est aussi important de comprendre les différents phénomènes physico-chimiques intervenant à l'interface liquide-vapeur (par exemple, les phénomènes d'échange entre la phase gaz et liquide) et comment celle-ci diffère du cœur du liquide.

L'exposé mettra en lumière une technique permettant d'étudier à l'aide de techniques de spectroscopie des solutions sous vide.

Si dès le début des années soixante-dix, Hans and Kai Siegbahn ont été les premiers réussir des mesures sur des liquides peu volatils (1), c'est seulement en 1997 que Manfred Faubel et ses collègues publient le premier spectre de photoélectrons de l'eau à l'aide d'une lampe à hélium et d'une technique de jet liquide se propageant dans le vide à haute vitesse (2). Cette technique développée, par le même groupe dans la fin des années quatre-vingt va alors déclencher dans le monde synchrotron le départ de nombreuses études scientifiques sur les liquides (3). L'exposé essayera d'explicitier les difficultés de cette technique et aussi ses nombreux avantages, expliquant pourquoi de tels dispositifs expérimentaux sont aujourd'hui présents dans de nombreux centres synchrotron. L'évolution des jet liquides permettant d'utiliser des jets plats est aussi très prometteuse. Un panorama, peut-être non exhaustif, sera fait des diverses utilisations de jet liquide, autre que pour la spectroscopie.

---

<sup>\*</sup>Intervenant

---

# Différents usages de la spectroscopie d'électrons en phase liquide

Remi Dupuy<sup>\*1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Chimie Physique - Matière et Rayonnement – Sorbonne Université UPMC Paris VI – France

## Résumé

Depuis maintenant plus de 25 ans, il est possible d'appliquer les méthodes de spectroscopie d'électrons à des échantillons liquides, notamment (mais pas seulement) grâce à la technique du microjet liquide sous vide. Les usages qui en sont fait sont variés. La sensibilité à la surface de la spectroscopie d'électrons en fait par exemple une technique de choix pour étudier l'interface liquide-vapeur, voire d'autres interfaces, avec des applications en science atmosphérique ou en électrochimie. Cela ouvre également la possibilité d'investiguer la structure électronique de molécules d'intérêt biologique dans leur environnement solvanté " naturel ", plutôt qu'isolées ou déposées en surface. D'autres domaines d'études incluent par exemple les dynamiques de relaxation ultra-rapides (transferts de charges, effets non-locaux), la structure des solutions (solvatation, liaisons hydrogènes) ou encore le transport des électrons dans le liquide. Après avoir introduit les domaines d'application de cette spectroscopie et les techniques utilisées, je montrerais deux exemples en particulier : l'utilisation de la mesure des distributions angulaires de photoélectron pour déterminer la structure d'une interface liquide-vapeur en présence de surfactants, et la possibilité d'utiliser des phénomènes de relaxation non-locaux pour accéder à la structure électronique spécifique de la couche de solvatation d'ions en solution.

---

<sup>\*</sup>Intervenant

---

# Simulation de la radiolyse de l'eau et de petite biomolécules solvatées par dynamique moléculaire *ab initio*.

Aashini Rajpal<sup>1</sup>, Christophe Nicolas<sup>2</sup>, Jean-Philippe Renault<sup>3</sup>, Marie-Françoise Politis<sup>4</sup>,  
and Marie-Anne Hervé Du Penhoat<sup>\*5</sup>

<sup>1</sup>2MIB, Université Paris-Saclay – CEA, CNRS, Université Paris-Saclay, CEA Saclay 91191 Gif sur Yvette France, Institut de Minéralogie, de Physique des Matériaux, et de Cosmochimie (IMPMC), Sorbonne Université, UMR CNRS 7590, Museum National d'Histoire Naturelle, IRD UMR 206, 4 place Jussieu, F-75005 Paris, Synchrotron Soleil, SOLEIL – France

<sup>2</sup>Synchrotron SOLEIL – Centre National de la Recherche Scientifique, Centre National de la Recherche Scientifique : UR1 – France

<sup>3</sup>NIMBE, CEA, CNRS UMR 3685, Université Paris-Saclay, CEA Saclay – CEA Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France – France

<sup>4</sup>Laboratoire Analyse et Modélisation pour la Biologie et l'Environnement (LAMBE - UMR 8587) – CEA, CNRS : UMR8587, Université d'Evry-Val d'Essonne – Bât. Mapertuis 1° étage bd François Mitterrand 91025 EVRY CEDEX, France

<sup>5</sup>IMPMC, Sorbonne Université, UMR CNRS 7590, MNHN – Institut de Minéralogie, de Physique des Matériaux, et de Cosmochimie (IMPMC), Sorbonne Université, UMR CNRS 7590, Museum National d'Histoire Naturelle, IRD UMR 206, 4 place Jussieu, F-75005 Paris – France

## Résumé

Lorsqu'un tissu biologique est soumis à un rayonnement ionisant, une cascade complexe d'événements physiques, chimiques et biologiques conduisent aux dommages observés (mort cellulaire, mutations). Cette cascade d'événements est initiée par l'excitation et l'ionisation des molécules présentes dans le milieu par les particules incidentes ou par les électrons secondaires. Une méthode théorique originale permet d'ioniser sélectivement une molécule décrite en phase liquide et de suivre les premières étapes de la fragmentation qui s'ensuit (1). L'évolution temporelle du système est simulée par dynamique moléculaire de type fonctionnelle densité dépendant du temps (TD-DFT), dans laquelle on laisse évoluer sur quelques dizaines de femtosecondes la fonction d'onde créée en enlevant une orbitale moléculaire choisie. Ceci est suivi par des simulations de dynamique moléculaire *ab initio* de type Car Parrinello ou Born Oppenheimer sur une picoseconde. Le cas d'ionisations doubles localisées sur une molécule d'eau dans l'eau liquide (1), puis sur l'uracile (2) et le désoxyribose (3) immergés dans l'eau a ainsi été étudié. Nous nous sommes plus récemment intéressés à l'un des mécanismes avancés pour expliquer les rendements élevés en radical HO2 mesurés lors de l'irradiation de solutions aqueuses désaérées par des ions de transfert d'énergie linéique élevé (4). Dans ce mécanisme, un atome d'oxygène provenant de l'explosion coulombienne d'une molécule d'eau doublement ionisée réagit avec un radical hydroxyle créé en son voisinage par

---

\*Intervenant

l'ionisation simple de molécules d'eau (5).

## Références

- (1) I. Tavernelli *et al.*, Time-Dependent Density Functional Theory Molecular Dynamics Simulations of Liquid Water Radiolysis. *ChemPhysChem* **2008**, *9*, 2099-103.
- (2) P. López-Tarifa *et al.*, Ultrafast Damage Following Radiation-Induced Oxidation of Uracil in Aqueous Solution. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 3160 –3163.
- (3) M.-A. Hervé du Penhoat *et al.*, Ultrafast fragmentation of highly-excited doubly-ionized deoxyribose: role of the liquid water environment. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2024**, *26*, 15693–704.
- (4) C. Ferradini and J.-P. Jay-Gerin, Does multiple ionization intervene for the production of HO2 radicals in high-LET liquid water radiolysis ? *Radiat. Phys. Chem.* **1998**, *51*, 263–267.
- (5) A. Rajpal, Radiolyse par les rayons X-mous de l'eau et des biomolécules : expériences et simulations. PhD Thesis, **2024**, Université Paris-Saclay.



---

# Interatomic Coulombic electron capture (ICEC) in solvated cations.

Nicolas Sisourat\*<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Chimie Physique - Matière et Rayonnement (LCPMR) – CNRS : UMR7614, Université Pierre et Marie Curie (UPMC) - Paris VI – 11 Rue Pierre et Marie Curie 75231 Paris Cedex 05, France

## Résumé

Intermolecular Coulombic Electron Capture (ICEC) is an environment assisted process in which a free electron can efficiently attach to a quantum system by transferring the excess energy of the electron capture to a neighbor ionizing it. ICEC is expected to be a general process that controls damage of living cells under ionizing irradiation. Furthermore, water being the solvent of life, it is therefore highly relevant to investigate ICEC in aqueous systems. The latter can thus reveal the potential impact of ICEC on radiation damage. In the last 5 years, our group has developed the methodology and numerical tools to investigate ICEC in various systems, ranging from rare gas dimers to micro-hydrated cations. More recently, we have focused our attention to ICEC in aqueous systems. In this contribution, I will give an overview of our works and summarize our current knowledge of ICEC. Furthermore, preliminary results on ICEC experiments using a liquid jet and the synchrotron radiation (PLEIADES@SOLEIL) will be reported.

---

\*Intervenant

---

# Caractérisation de la structure supramoléculaire en solution par spectroscopie FZRET en microjet liquide.

Eric Gloaguen<sup>\*1</sup>

<sup>1</sup>Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay – Université Paris-Saclay, Centre National de la Recherche Scientifique, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR8214 – France

## Résumé

La spectroscopie FZRET (Far-Zone Resonant Energy Transfer) repose sur le transfert d'énergie résonant entre atomes donneurs et accepteurs dans le domaine des rayons X. Sensible à la distance donneur-accepteur, cette technique spectroscopique avancée permet d'étudier la structure avec une résolution spatiale atomique.(1) Pour la première application de cette spectroscopie à un microjet liquide, une solution aqueuse d'acétate de potassium concentrée a été choisie. L'étude de plusieurs couples donneur-accepteur a permis de caractériser les distributions de distances cation-anion, cation-eau et cation-cation, sondant ainsi l'organisation supramoléculaire de la solution. Ces expériences ont révélé une distribution inhomogène des ions dans l'eau, cohérente avec la présence d'agrégats ioniques de taille nanométrique en solution. (1) D. Céolin, J. P. Rueff, A. Zimin, P. Morin, V. Kimberg, S. Polyutov, H. Agren, F. Gel'mukhanov,"Far-Zone Resonant Energy Transfer in X-Ray Photoemission as a Structure Determination Tool" *J. Phys. Chem. Lett.* **2017**, 8, 2730.

---

<sup>\*</sup>Intervenant

---

# Modélisation de propriétés structurales et spectroscopiques de systèmes complexes: des champs de forces dérivés de la chimie quantique aux potentiels machine learning

Carine Clavaguéra<sup>\*1</sup>

<sup>1</sup>Institut de Chimie Physique (ICP) – Université Paris-Saclay, Centre National de la Recherche Scientifique, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR8000 – France

## Résumé

Le traitement précis de l'environnement est aujourd'hui encore un enjeu majeur en chimie théorique en raison de la difficulté à allier une description réaliste du système étudié et un niveau de précision suffisant. Dans ce cadre, plusieurs approches seront présentées à travers des exemples représentatifs, issus à la fois des travaux menés au sein de notre équipe et de la littérature.

Le développement de champs de force polarisables à partir de données obtenues par la chimie quantique permet de calculer diverses propriétés physico-chimiques de molécules en phase gazeuse, ainsi que dans les phases condensées de systèmes solvatés ou cristallins. Ces champs de forces dit de nouvelle génération sont notamment mis en œuvre dans les simulations de dynamique moléculaire classique, qui rendent possible le calcul des propriétés structurales et spectroscopiques (infrarouge, dichroïsme circulaire vibrationnel...) des systèmes d'intérêt incluant leur environnement chimique.

Les effets de structuration à l'interface entre des nanoparticules métalliques et le solvant nécessitent eux-aussi un traitement précis des interactions intermoléculaires sur des échelles de temps difficilement accessibles par les simulations premiers principes tenant compte explicitement de la structure électronique.

Enfin, quelques exemples récents de potentiels intermoléculaires issus de l'apprentissage automatique seront présentés comme une approche en devenir pour modéliser des systèmes de grande taille à un coût bien inférieur à celui des méthodes *ab initio*.

## References

- (1) J. Bowles, S. Jähnigen, F. Agostini, R. Vuilleumier, A. Zehnacker, F. Calvo, C. Clavaguéra *ChemPhysChem* 2024, 25 (8).
- (2) C. Clavaguéra, F. Thaunay, G. Ohanessian *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2021, 23, 24428.
- (3) R. Tandiana, E. Brun, C. Sicard-Roselli, D. Domin, N.T. Van-Oanh, C. Clavaguéra,

---

<sup>\*</sup>Intervenant

J. Chem. Phys., 2021, 154 (4), 044706.

(4) R. Vangheluwe, C. Clavaguéra, M.T. Truong, D. Domin, C.H. Pham, M.C. Marinica, N.T. Van Oanh, *ChemPhysChem* 2025, 26, e202500268.

---

# Simulations de la réactivité chimique dans des aérosols aqueux

Miguel De La Puente , Rolf David<sup>1</sup>, and Damien Laage<sup>\*2</sup>

<sup>1</sup>PASTEUR, Département de Chimie, École Normale Supérieure, PSL, Sorbonne Université, CNRS –  
Ecole Normale Supérieure de Paris - ENS Paris – France

<sup>2</sup>Ecole Normale Supérieure, Chemistry Department – Ecole Normale Supérieure de Paris - ENS Paris,  
Centre National de la Recherche Scientifique - CNRS, Université Pierre et Marie Curie [UPMC] - Paris  
VI – France

## Résumé

Des expériences récentes ont montré que la réactivité chimique à l'interface eau-air peut être radicalement différente de celle en solution, et que nombre de réactions, lentes ou défavorables dans le liquide, peuvent être facilitées dans des microgouttelettes aqueuses, ouvrant ainsi des perspectives prometteuses pour la catalyse verte. Cependant, l'origine moléculaire de cette réactivité unique des interfaces reste débattue. Nous montrerons comment des simulations de dynamique moléculaire réactive, basées sur des potentiels d'apprentissage automatique entraînés au niveau de la théorie de la fonctionnelle de la densité et intégrant explicitement les effets quantiques nucléaires, permettent de décrire à l'échelle moléculaire la réactivité interfaciale. Nous démontrerons également comment ces résultats peuvent être intégrés dans des modèles analytiques pour être généralisés à un large éventail de tailles de gouttelettes. Nous présenterons l'application de cette approche à deux questions clés concernant la réactivité chimique dans les microgouttelettes. Premièrement, nous montrerons comment le pH de gouttelettes d'eau pure varie en fonction de leur taille, comment cela influence la distribution des ions hydronium et hydroxyde en leur sein, et comment l'adsorption préférentielle des ions hydronium à l'interface peut être confirmée par le calcul de spectres de spectroscopie par somme de fréquences à l'aide de réseaux de neurones. Deuxièmement, nous explorerons comment les gouttelettes aqueuses favorisent la formation de liaisons peptidiques en l'absence de catalyseurs, une réaction d'une grande importance pour la chimie prébiotique, qui a été observée expérimentalement comme étant facilitée à l'interface air-eau et dans les microgouttelettes.

---

<sup>\*</sup>Intervenant

---

# Attosecond Electron Spectroscopy in Liquid Water

Hugo Marroux<sup>\*1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire Interactions, Dynamiques et Lasers (ex SPAM) – Institut Rayonnement Matière de Saclay (DRF), Université Paris-Saclay, CY Cergy Paris Université – France

## Résumé

The scattering of low-energy electrons in an aqueous medium is a fundamental process relevant to fields ranging from radiochemistry to radiotherapy, yet it remains challenging to investigate experimentally. Angular-resolved photoemission studies have revealed that these electrons have elastic and inelastic mean free paths shorter than 10 nm. However, no target of such thickness can currently be fabricated, preventing any direct transmission experiments. Our approach aims to observe this decoherence phenomenon in the time domain, on the attosecond timescale ( $10^{-15}$  s). The mean free time between two collisions lies between 250 and 2500 attoseconds, which coincides with the characteristic temporal resolution of the RABBIT technique (Reconstruction of Attosecond Beating By Two-photon Transitions). In this talk, I will provide a pedagogical introduction to attosecond spectroscopies and their application to liquid water. I will also show how the contrast of this electronic interferometry allows us to retrieve the decoherence dynamics in an aqueous environment for electrons with kinetic energies ranging from 25 to 62 eV.

---

<sup>\*</sup>Intervenant

---

# Désorption laser de microgouttelettes sous vide

Nicolas Nieuwjaer<sup>\*1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Physique des Lasers – Institut Galilée, université Paris 13, CNRS : UMR7538 – France

## Résumé

Les fonctions des objets d'intérêt biologique sont intimement liées à leur structure. La détermination de cette structure peut se faire via des techniques d'analyse physico-chimique en phase gazeuse, ce qui permet de contrôler précisément la stoechiométrie des systèmes étudiés. Faire passer des objets d'intérêt biologique complexes en phase gazeuse n'a cependant rien d'anodin, et cette mise en phase gazeuse n'a été rendue possible que dans les années 1980 avec le développement de méthodes d'ionisation dites "douces", telles que l'électro-nébulisation ou la désorption laser assistée par matrice. Rien ne garantit cependant pour des biomolécules flexibles que les structures déterminées en phase gazeuse soient identiques à celles de la phase condensée, ni même d'ailleurs qu'elles en soient proches (1). Conserver au mieux la structure native de la phase condensée lors de la mise en phase gazeuse, et se donner la possibilité de mettre en phase gazeuse des systèmes hydratés, s'avèrent donc être des enjeux cruciaux pour pouvoir extrapoler les résultats obtenus en phase gazeuse à la phase condensée, et donc à la quasi-totalité des applications biologiques. C'est dans cette perspective que l'équipe Biomolécules et Spectroscopies du LPL développe une technique innovante de mise en phase gazeuse : la désorption laser de microgouttelettes sous vide (2). Initialement proposée par Brutschy et al.(3), cette source s'inscrit dans la continuité des jets liquides. Des microgouttelettes liquides de 50  $\mu$ m de diamètre sont produites par un générateur commercial et transférées sous vide au travers de plusieurs étages de pompage différentiel. Suite à l'irradiation de ces gouttelettes par un laser infra-rouge accordé sur une bande d'absorption du solvant, des ions biomoléculaires sont éjectés directement sous vide, puis analysés dans un spectromètre de masse à temps de vol. Ces ions peuvent ainsi être identifiés et caractérisés en phase gazeuse à partir d'un environnement contrôlé. Je présenterai les caractéristiques de cette source de mise en phase gazeuse et son potentiel pour une meilleure prise en compte des effets d'environnement dans les études structurales en phase gazeuse.

(1) Breuker et al. *Proc. Nat. Acad. Sci.* 105 (2008) 18145-18152.

(2) Badri et al. *Rev. Sci. Instrum.* 96 (2025) 065206.

(3) Morgner et al. *Aust. J. Chem.* 59 (2006) 109-114.

---

<sup>\*</sup>Intervenant

---

# Analogues de glaces interstellaires irradiées par des photons.

Géraldine Feraud<sup>\*1</sup>, Romain Basalgète, Antoine Hacquard<sup>2</sup>, Daniela Torres Díaz\*, Rémi Dupuy, Claire Romanzin, Xavier Michaut, Pascal Jeseck<sup>3</sup>, Laurent Philippe<sup>2</sup>, Lionel Amiaud<sup>4</sup>, A Lafosse, Samuel Del Fré, Alejandro Rivero Santamaria, Denis Duflot<sup>5</sup>, Maurice Monnerville, Jean-Hugues Fillion, and Mathieu Bertin

<sup>1</sup>FERAUD – Université Pierre et Marie Curie [UPMC] - Paris VI – France

<sup>2</sup>MONARIS, De la Molécule aux Nanos-objets : Réactivité, Interactions et Spectroscopies – Sorbonne Université – France

<sup>3</sup>De la Molécule aux Nanos-objets : Réactivité, Interactions et Spectroscopies (MONARIS) – Sorbonne Université UPMC Paris VI, Centre national de la recherche scientifique - CNRS (France) – France

<sup>4</sup>Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay (ISMO) – Université Paris-Saclay, CNRS, Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, 91405 Orsay, France – France

<sup>5</sup>Laboratoire de Physique des Lasers, Atomes et Molécules - UMR 8523 – Université de Lille, Centre National de la Recherche Scientifique, Université de Lille : UMR8523, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR8523 – France

## Résumé

Dans les zones les plus froides du milieu interstellaire, les grains de poussière sont recouverts de glaces moléculaires composées d'eau, de monoxyde de carbone, de dioxyde de carbone, mais aussi de molécules plus complexes telles que le méthanol. Ils constituent le principal réservoir moléculaire de ces régions et présentent donc un grand intérêt pour l'astrochimie (1).

Ces glaces évoluent lorsqu'elles reçoivent de l'énergie de leur environnement, par exemple lorsqu'elles sont irradiées par des photons UV. Ces interactions finissent par modifier la composition de la glace ou libérer des molécules/radicaux dans la phase gazeuse. L'excitation électronique des molécules condensées peut ainsi entraîner la désorption des molécules de surface dans la phase gazeuse. Les mécanismes à l'œuvre lors de la désorption photo-induite sont mal caractérisés. Les résultats récents d'expériences en laboratoire sur des analogues de glace interstellaire exposés à des photons UV provenant de sources laser ou du synchrotron Soleil seront présentés, dans le but de dévoiler les mécanismes de désorption (2,3,4).

1 Öberg, K. I. Photochemistry and Astrochemistry: Photochemical Pathways to Interstellar Complex Organic Molecules. *Chemical Reviews* 2016, 116 (17), 9631–9663.

2 Del Fré, S.; Santamaría, A. R.; Duflot, D.; Basalgète, R.; Feraud, G.; Bertin, M.; Fillion, J.-H.; Monnerville, M. Mechanism of Ultraviolet-Induced CO Desorption from CO Ice: Role of Vibrational Relaxation Highlighted. *Phys. Rev. Lett.* 2023, 131 (23), 238001.

---

\*Intervenant



3 Basalgète, R.; Ocaña, A. J.; Féraud, G.; Romanzin, C.; Philippe, L.; Michaut, X.; Fillion, J.-H.; Bertin, M. Photodesorption of Acetonitrile  $\text{CH}_3\text{CN}$  in UV-Irradiated Regions of the Interstellar Medium: Experimental Evidence. *The Astrophysical Journal* 2021, 922 (2), 213.

4 Dupuy, R.; Bertin, M.; Féraud, G.; Michaut, X.; Marie-Jeanne, P.; Jeseck, P.; Philippe, L.; Baglin, V.; Cimino, R.; Romanzin, C.; Fillion, J.-H. Mechanism of Indirect Photon-Induced Desorption at the Water Ice Surface. *Physical Review Letters* 2021, 126 (15).

---

# Levitating single particles: main techniques, analytical coupling methods and application examples

Sophie Sobanska<sup>\*1,2</sup>

<sup>1</sup>Institut des Sciences Moléculaires (ISM) – CNRS : UMR5255 – Bâtiment A 12 351 cours de la Libération 33405 TALENCE CEDEX, France

<sup>2</sup>Institut des Sciences Moléculaires – CNRS : UMR5255 – France

## Résumé

Since the ability to trap and manipulate small particle was demonstrated in the early 20th century (1), levitation techniques are now expanded into various disciplines of physics, chemistry and biology. Trapping a single aerosol particle allows detailed investigation of its fundamental properties over extended times without external interferences (i.e. substrate). The advancement of trapping technologies has enabled a wide range of applications in nanoparticle manipulation, materials science, biomedical engineering, and aerosol science for instance. Various physical forces can be used to counteract gravity, including electrostatic, magnetic, optical, acoustic, aerodynamic, and other forces. Today the most popular levitation techniques used are optical tweezer (2-4), acoustic levitation (4) and electrodynamic balance (5). These techniques can be easily coupled with a variety of analytical techniques to probe the evolution of particle morphology and chemical composition for example. We will provide a brief overview of the principles behind these levitation techniques, highlighting their key advantages and disadvantages, common analytical couplings, and selected applications. Finally, we will focus on few examples in the field of atmospheric aerosol science. In particular, we will demonstrate how levitation techniques offer new insights into the formation and aging of secondary organic aerosols.

*Acknowledgments: The authors thank the ANR for supporting SOAPHY project (ANR-21-CE29-0031) and the Région Nouvelle Aquitaine for LEVIAERO project (noAAPR2022-2021-17126210).*

(1) E. James Davis (1997) A History of Single Aerosol Particle Levitation, *Aerosol Science and Technology*, 26:3, 212-254, DOI: 10.1080/02786829708965426

(2) Ashkin A . (1970) Acceleration and trapping of particles by radiation pressure. *Phys Rev Lett* 24, 156–9.

(3) Zhiyong Gong, et al. (2018) Optical trapping and manipulation of single particles in air: Principles, technical details, and applications. *JQSRT* 214, 94–119, DOI: 10.1016/j.jqsrt.2018.04.027

(4) J. L. Thomas, R., Marchiano, D. Baresch (2017) Acoustical and optical radiation pressure and the development of single beam acoustical tweezers. *JQSRT* 195(2017)55–65, DOI:

---

\*Intervenant

/10.1016/j.jqsrt.2017.01.012

(5) R. K. Kohli, R. D. Davis, J. F. Davies (2023) Tutorial: Electrodynamic balance methods for single particle levitation and the physicochemical analysis of aerosol. *J. of Aerosol Sci.* 174, 106255 DOI: 10.1016/j.jaerosci.2023.106255



## Posters



---

# Vibrational laser action spectroscopy of isolated and micro-hydrated sugar-based photosensitizer model in gas phase

Arsène Kossov<sup>\*1</sup> and Pierre Carcabal<sup>2</sup>

<sup>1</sup>SYSIPHE (ISMO) – Institut des Sciences Moléculaires d’Orsay (ISMO) – France

<sup>2</sup>InterMo (LCAR) – Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité – France

## Résumé

Sugars are a family of biomolecules that are ubiquitous in nature and in living organisms. Less studied than proteins, they play an important role in lots of processes such as energy storage, material structure or molecular recognition.(1) The latter is possible thanks to a plethora of non-covalent bonding interactions such as dispersion (or London van der Waals) interaction or the hydrogen bonds created by polar groups in the flexible structures of monosaccharides. Photosensitizers are conceived using sugars molecular recognition properties to target cancer cells and destroy them by irradiating the molecule with light generating reactive oxygen species. When added to the two partners the role of water seems to be crucial and its interaction with the molecular complex able to change the geometrical properties of such assemblies.(2)

We decided to study a photosensitizer model (S1A) that uses mannose as a probe in isolated and micro-hydrated environment with conformer selective double resonance laser action spectroscopy. Understanding the favoured structures of this model, we hope to gain understanding on its molecular recognition processes. Another key aspect is to understand the structural role of water molecules and how microhydration can play on the observed structures. During the study of the vibrational modes of S1A+H<sub>2</sub>O, interesting physical phenomena have been observed by deuterating the water molecules in order to identify OH stretching bands of water, such as a conformer-dependent shift in the electronic excitation energy between S1A+H<sub>2</sub>O and S1A+D<sub>2</sub>O that gives us intel on the potential energy wells of those systems.

(1) Ernst, B.; Hart, G. W.; Sinaý, P. *Carbohydrates in Chemistry and Biology*, 1st ed.; Wiley, 2000. <https://doi.org/10.1002/9783527618255>.

(2) Chaplin, M. Do We Underestimate the Importance of Water in Cell Biology? *Nat Rev Mol Cell Biol* **2006**, 7 (11), 861–866. <https://doi.org/10.1038/nrm2021>.

---

<sup>\*</sup>Intervenant

---

# Laser Induced Liquid Bead Desorption

Alper Laçin<sup>\*1</sup>, Ayoub Badri<sup>\*1</sup>, Charles Desfrancois<sup>1</sup>, Alberto Macario Farto<sup>1</sup>, Bruno Manil<sup>1</sup>, Frederic Lecomte<sup>1</sup>, and Nicolas Nieuwjaer<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Physique des Lasers – université Paris 13, Centre National de la Recherche Scientifique, Université Sorbonne Paris nord – France

## Résumé

The introduction of large biomolecules into the gas phase has become possible thanks to the development of "soft" ionization sources, such as electrospray or matrix-assisted laser desorption. Although these sources are able to preserve weak interactions during the gas-phase transfer, the desorption process can induce structural changes, and the biological relevance of the resulting studies is not always ensured.

In this context, the "Biomolecules and Spectroscopies" team is developing a **laser induced liquid bead ion desorption (LILBID)**, a new laser-desorption source based on microdroplets : liquid microdroplets (50  $\mu\text{m}$  diameter), containing the biomolecules of interest are irradiated under vacuum with an infrared laser. This innovative approach combines the advantage of the gas phase (stoichiometric control, ion manipulation and trapping) with the potential to preserve the native structure of biomolecules.

One of the current challenges is to characterize the desorption process in greater detail in order to optimize the desorption of hydrated biomolecules. Preably selected examples of hydrated flexible biomolecules will then be analyzed by infrared spectroscopy to study the possible structural changes induced by microsolvation.

Another aim is to detect any possible state change of the microdroplets that may occur as they evolve inside the vacuum chambers. Indeed, evaporative cooling phenomenon could induce the solidification of a microdroplet before its interaction with the infrared desorption laser. To address this issue, a polarization-based detection system is being implemented. This setup allows monitoring the liquid or solid state of the microdroplet by visualizing the possible depolarization of a laser beam scattered by the droplet. Such depolarization is due to the formation of a rough surface during solidification.

---

<sup>\*</sup>Intervenant

---

# Etude structurale de complexes hôte-invité avec des cages moléculaires.

Manal Al Sahmarani<sup>\*1</sup>, Ayoub Badri<sup>1</sup>, Giel Berden<sup>2</sup>, Jos Oomens<sup>2</sup>, D. Scuderi<sup>3</sup>, Fabien Chirot<sup>4</sup>, Charles Desfrancois<sup>1</sup>, Alberto Farto Macario<sup>1</sup>, Frédéric Lecomte<sup>1</sup>, Bruno Manil<sup>1</sup>, and Nicolas Nieuwjaer<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Physique des Lasers, 93430 Villetaneuse – CNRS, Université Sorbonne Paris nord – France

<sup>2</sup>Institute for Molecules and Materials [Nijmegen] – Pays-Bas

<sup>3</sup>Insitut chimie-physique, 91405 Orsay Cedex – Université Paris-Saclay, CNRS UMR 8000 – France

<sup>4</sup>Institut Lumière Matière [Villeurbanne] – Université Claude Bernard Lyon 1, Centre National de la Recherche Scientifique – France

## Résumé

Les cyclodextrines (CD) sont des molécules cycliques, constituées par un assemblage d'unités glucopyranoses reliées par des liaisons  $\alpha$ -1,4. On distingue trois types de cyclodextrines : les  $\alpha$ -,  $\beta$ - et  $\gamma$ -CD, formées respectivement de six, sept et huit unités de glucose, qui diffèrent par leur taille. Elles ont une structure conique tronquée possédant un extérieur hydrophile en raison de la présence de groupes hydroxyle, et une cavité centrale hydrophobe permettant aux molécules de faible polarité d'être encapsulées partiellement ou entièrement par une interaction hôte-invité, menant à la formation de complexes d'inclusion hydrosolubles. Ces cages moléculaires peuvent ainsi être utilisées comme biocapteurs pour la détection de traces de paracétamol dans l'eau potable.

Nous avons montré que le paracétamol et la  $\beta$ -CD formaient un complexe d'inclusion en phase gazeuse. Je m'intéresse maintenant à l'effet de la taille de la cage moléculaire sur la structure du complexe formé avec le paracétamol.

Pour déterminer la structure de ces complexes, des spectres de spectroscopie infrarouge par dissociation multiphotonique sur des complexes isolés sélectionnés en masse sont comparés à des calculs de chimie quantique.

---

<sup>\*</sup>Intervenant

---

# High-resolution Structure and Energetics of The DABCO Complexes Probed with VUV Radiation

Audrey Scognamiglio<sup>\*1</sup>, Oriane Shviro<sup>1</sup>, Baptiste Zarié<sup>1</sup>, Lou Barreau<sup>1</sup>, Constant Schouder<sup>1</sup>, Béranger Gans<sup>1</sup>, Eric Gloaguen<sup>1</sup>, Denis Cubaynes<sup>1</sup>, Gabriel A. Garcia<sup>2</sup>, Laurent Nahon<sup>2</sup>, Aurélien De La Lande<sup>3</sup>, and Lionel Poisson<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay – Université Paris-Saclay, Centre National de la Recherche Scientifique, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR8214 – France

<sup>2</sup>Synchrotron SOLEIL – Centre National de la Recherche Scientifique, Centre National de la Recherche Scientifique : UR1 – France

<sup>3</sup>Institut de Chimie Physique – Institut de Chimie - CNRS Chimie, Université Paris-Saclay, Centre National de la Recherche Scientifique – France

## Résumé

The diffusion of electrons in matter generates secondary species, such as secondary electrons and radicals, that can interact with nearby species. In cells, these interactions may cause DNA damage and increase cancer risk (1). Recently, studies have shown that data on both elastic and inelastic scattering in small water clusters can support the development of theoretical models to predict energy transport at the macroscopic scale (2). Clusters, in particular, provide effective models for describing organized condensed matter (3). Our approach uses a highly symmetrical molecule, DABCO, known for its atomic-like orbitals (4), deposited on argon and water clusters and ionized via a 1-photon transition with synchrotron light (DESIRS beamline). Coincident ion and electron detection allows precise identification of the products formed and their photoelectron distributions. We have gathered detailed information on the electronic and vibrational structure of the isolated molecule and small clusters – examined here with unprecedented precision. We have as well retrieved information on the photoelectron angular distribution in both cases, from which we aim to gain insights on electron scattering processes.

## References

(1) E. Alizadeh, T. M. Orlando and L. Sanche, "Biomolecular Damage Induced by Ionizing Radiation: The Direct and Indirect Effects of Low-Energy Electrons on DNA", *Annu. Rev. Phys. Chem.*, **66**, 379-398 (2015)

(2) S. Hartweg, B. L. Yoder, G. A. Garcia, L. Nahon and R. Signorell, "Size-Resolved Photoelectron Anisotropy of Gas Phase Water Clusters and Predictions for Liquid Water", *Phys. Rev. Lett.*, **118**, 103402 (2017)

(3) J. Jortner, "Cluster Size Effects", *Z. Phys. D - Atoms Molec. Clusters*, **3**, 247-275 (1992)

(4) L. Poisson, R. Maksimenska, B. Soep, J.-M. Mestdagh, D. H. Parker, M. Nsangou, and M. Hochlaf, "Unusual Quantum Interference in the S1 State of DABCO and Observation of Intramolecular Vibrational Redistribution", *J. Phys. Chem. A.*, **114**, 3313-3319 (2010)

---

<sup>\*</sup>Intervenant



---

# Structural Characterization of Interstellar Water Ice Analogues: Optical and Morphological Evolution with Deposition Conditions

Delfina Toulouse<sup>\*1</sup>

<sup>1</sup>De la Molécule aux Nanos-objets : Réactivité, Interactions et Spectroscopies – Institut de Chimie - CNRS Chimie, Sorbonne Université, Centre National de la Recherche Scientifique – France

## Résumé

The structure and morphology of interstellar water ice analogues play a crucial role in molecular adsorption and surface chemistry, influencing processes such as H adsorption in cold astrophysical environments. In this study, we investigate the physical properties of amorphous solid water (ASW) ices deposited at 10 K, 25K and 90 K under ultra-high vacuum using the COSPINU2 setup. Employing a multi-probe approach-combining near- and mid-infrared FTIR spectroscopy, He-Ne laser reflectometry, and optical imaging (Hg vapor lamp and white light)-we characterized ASW films grown via background deposition with thickness ranging from 0 to 10 $\mu$ m, and at three different deposition rates.

We retrieved the optical constants of the ice films under each condition. Notably, for higher deposition rates, we observed an abrupt decrease in specular reflectance and increased diffuse scattering, suggesting a phase transition in the ice structure not seen at lower rates. This points toward a restructuring process during deposition, with slower rates favouring the formation of more stable morphologies.

These findings offer critical insight into the microphysical properties of water ice relevant to astrophysical environments. A better understanding of how deposition conditions influence porosity and surface structure will improve models of H adsorption and desorption dynamics. This structural perspective directly supports ongoing efforts to characterize the interaction of HD, H and D with ASW ices and their role in spin-state chemistry and energy transfer mechanisms in cold molecular clouds.

---

<sup>\*</sup>Intervenant

---

# Laser Desorption on Water Microdroplets for Gas Phase Characterization

Ayoub Badri<sup>\*1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Physique des Lasers, 93430 Villetaneuse – CNRS, Université Sorbonne Paris nord – France

## Résumé

The gas phase desorption of large biomolecules has been made possible by the advent in the last decades of soft sources, such as electrospray ionization or matrix assisted laser desorption sources. Even if these sources have the capability to preserve low interactions in the gas phase, the desorption process might generate structural changes of the biomolecules and relevance for biological understanding is not always assessed. In this context, we have started the development of a new laser induced liquid bead ion desorption (LILBID) source : liquid micro droplets (50  $\mu\text{m}$  diameter), containing the biomolecules of interest, are laser ablated directly under vacuum. This innovative source will allow to benefit from the gas phase advantages (stoichiometry control, ions manipulation and trapping) while preserving the biomolecules native structure. The analysis is made by a time of flight mass spectrometer<sup>2</sup>. For the very first time, we have obtained a water microdroplet under vacuum. We are now coupling our system with an infrared desorption laser to study the desorption phenomenon in detail and to potentially confirm the desorption possibility of hydrated species.

---

<sup>\*</sup>Intervenant

---

# PhotoSynapt: A Multimodal Platform Merging Ion Mobility, Mass Spectrometry, and IR Spectroscopy

Jean-Xavier Bardaud<sup>\*1</sup>, Steven Daly<sup>2</sup>, Lucas Schwob<sup>3</sup>, and Debora Scuderi<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Institut de chimie physique – Université Paris, CNRS – France

<sup>2</sup>MS Vision, Spectrometry Vision B.V. – Pays-Bas

<sup>3</sup>Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY) – Allemagne

<sup>4</sup>Institut de Chimie Physique – Université Paris-Saclay, CNRS – France

## Résumé

PhotoSynapt is a novel, multidimensional spectrometer that integrates ion mobility–mass spectrometry (IM-MS) with infrared (IR) action spectroscopy within a single experiment (1). IM-MS has proven to be a powerful technique for elucidating structural information, enabling the separation of ions with identical  $m/z$  values according to their size, mass, shape, and charge (2). However, IM-MS alone is insensitive to secondary structure and cannot directly probe conformational changes. To overcome this limitation, mass- and mobility-selected IR spectroscopy allows the direct investigation of isomeric species and conformational changes (3).

To establish this type of hyphenated system, a new commercial instrument, PhotoSynapt, was acquired. The platform is based on a customized Synapt - T-Wave/TOF - mass spectrometer (Waters), modified to enable ion mobility slicing, ion trapping, and an optical access. Two pin traps were incorporated between the transfer T-Wave and TOF region with an optical access for tunable IR laser to perform infrared multiple photon dissociation (IRMPD) spectroscopy.

By combining these orthogonal dimensions, PhotoSynapt offers a multidimensional analytical platform enables the structural characterization of isomers. It serves as a versatile tool for:

- Conformational studies
- Isomer differentiation and characterization
- IR gas-phase spectroscopy

This integrated approach opens new avenues for the detailed structural elucidation of complex molecular systems.

(1) Bakels, S.; Daly, S.; Doğan, B.; Baerenfaenger, M.; Commandeur, J.; Rijs, A. M. Probing High-Order Transient Oligomers Using Ion Mobility Mass Spectrometry Coupled with Infrared Action Spectroscopy. *Anal. Chem.* **2024**, *96* (34), 13962–13970.

(2) *Ion Mobility-Mass Spectrometry: Fundamentals and Applications*; Ashcroft, A. E., Sobott, F., Eds.; New Developments in Mass Spectrometry; Royal Society of Chemistry: Cambridge,

---

<sup>\*</sup>Intervenant

**2021.**

(3) Stroganova, I.; Rijs, A. M. CHAPTER 9. Ion Spectroscopy Coupled to Ion Mobility–Mass Spectrometry. In *New Developments in Mass Spectrometry*; Ashcroft, A. E., Sobott, F., Eds.; Royal Society of Chemistry: Cambridge, **2021**; pp 206–242.

---

# AI Algorithms for Laser-Induced Breakdown Spectroscopy of Nanoparticles

Marc Briant<sup>\*1,2</sup>

<sup>1</sup>CEA Saclay – CEA-DRF-IRAMIS, CEA, DRF, IRAMIS, NIMBE – France

<sup>2</sup>CEA-DRF-IRAMIS-NIMBE – CEA-DRF-IRAMIS – France

## Résumé

Our researches focuses on the custom synthesis and characterisation of various nano-objects. One of our key manufacturing processes is laser pyrolysis (1, 2), which uses a high-power CO<sub>2</sub> laser (2 to 3 kW) to synthesize nanoparticles in the gas phase. This process involves the interaction of the laser with a stream of precursors in a controlled atmosphere, forming nanoparticles within the laser pyrolysis flame. The properties of the resulting nanoparticles are determined by the nature and quantities of the reactants injected into the reactor.

Currently, nanoparticles are characterized after synthesis. If their properties are not suitable, the process must be repeated with modified precursor injections, wasting considerable time. To address this, real-time characterization during synthesis is being explored. This involves qualitative analysis (identifying elements) and quantitative analysis (determining elemental composition) to adjust synthesis parameters in real time fly.

Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS) (3, 4) can be used to identify and quantify many elements at the cost of spectral analysis. However, analysing a large number of spectra in real-time requires advanced data processing. As this is a classification problem, related works show that it is interesting to use approaches based on Artificial Intelligence (AI) (5).

More specifically, the approach considered in this work was initially developed for infrared spectroscopy (6). It uses a Peak Correlation Classifier (PCC) algorithm that includes a Support Vector Machine (SVM) classifier. The PCC algorithm extracts a vector of correlations between an annotated reference spectrum and an unknown spectrum, characterizing the unknown spectrum relative to the reference. Several reference spectra, corresponding to different atomic elements or concentrations, are used to create a database for training the SVM.

Our objective is to adapt the PCC and train the SVM classifier to determine the optimal transformation to separate data based on whether a spectrum contains the atomic or ionic lines of the desired element. Then, in real-time, during the synthesis process, the SVM algorithm will identify if the acquired spectrum contains the desired elements. Finally, the algorithm will be adapted for quantitative analysis.

References:

---

<sup>\*</sup>Intervenant

- (1) Y. Q. He, X. G. Li and M. T. Swihart, *Chem. Mater.*, 17 (2005) 1017–1026.
- (2) O. Sublemontier, H. Kintz, F. Lacour, X. Paquez, V. Maurice, Y. Leconte, D. Porterat, N. Herlin-Boime and C. Reynaud, *Kona Powder And Particule Journal*, (2011) 236–250.
- (3) F. A. Barreda, C. Nicolas, J. B. Sirven, F. X. Ouf, J. L. Lacour, E. Robert, S. Benkoula, J. Yon, C. Miron and O. Sublemontier, *Sci. Rep.*, 5 (2015) 15696.
- (4) P. Liu, P. J. Ziemann, D. B. Kittelson and P. H. McMurry, *Aerosol Sci. Tech.*, 22 (1995) 293–313.
- (5) P. Malfrat, J. Bobin and A. de Vismes Ott, *Appl. Radiat. Isot.*, 201 (2023) 111011.
- (6) R. M. French, V. Simic and M. Thevenin, *Iet Signal Process.*, 14 (2020) 737–744.