

## **Proposition de thèse de doctorat en physique**

*Laboratoire :*

**Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité (LCAR – UMR5589)**

Université Paul Sabatier - Bat. 3R4

118 route de Narbonne

31062 Toulouse Cedex 09, France

*Directeur de thèse :*

**Alexandre MARCINIAK** (Chercheur CNRS)

[alexandre.marciniak@irsamc.ups-tlse.fr](mailto:alexandre.marciniak@irsamc.ups-tlse.fr)

<https://www.lcar.ups-tlse.fr/marciniak/>

*Financement :* Bourse du Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche (à obtenir)

*Date de début :* Octobre 2023

---

---

### **Spectroscopie infrarouge d'astro-nanograins carbonés isolés dans des conditions extrêmes**

**Mots clés :** Physico-chimie expérimentale, physique moléculaire, spectroscopie, agrégats, spectrométrie de masse, optique

Dans le milieu interstellaire (ISM), les grains cosmiques ont un rôle majeur car ils servent de plateformes catalytiques sur lesquelles interagissent des molécules de la phase gazeuse. De là naissent de nouvelles espèces qui enrichissent chimiquement les régions de formation stellaire et planétaire. Dans certaines régions de l'ISM, il existe une population abondante de grains qui ont une taille (sub-)nanométrique, appelés nanograins. Ayant un grand rapport surface sur volume, ces nanograins ont un rôle majeur dans l'évolution physique et chimique de ces régions. A l'échelle microscopique, les nanograins sont des agrégats atomiques ou moléculaires allant jusqu'à la molécule unique d'hydrocarbure aromatique polycyclique (PAH) [1]. En outre, la morphologie des nanograins influence fortement les interactions fondamentales (adsorption, désorption, diffusion moléculaire) qu'ils ont avec les molécules de la phase gazeuse (e.g. H<sub>2</sub>O, CO, etc.). L'étude de la structure des nanograins est donc une étape cruciale vers la compréhension de la (photo-)réactivité de ces systèmes dans l'ISM, mais reste encore trop peu explorée à ce jour [2].

Le dispositif PIRENEA 2 (voir Figure 1) a été développé dans le cadre de l'ERC-Synergy NANOCOSMOS [3,4] afin d'étudier les interactions gaz-nanograin-photon d'intérêt en astrochimie. Dans sa configuration finale, PIRENEA 2 sera équipée d'une source d'agrégats moléculaires pour produire des agrégats de HAP, d'un piège à ions cryogénique quadripolaire permettant de thermaliser les agrégats, d'adsorber de petites molécules de la phase gazeuse (H<sub>2</sub>O, CO) ou de réaliser du « tagging » [2] et, finalement, d'une cellule cryogénique ICR pour isoler les nanograins dans des conditions extrêmes (~10 K, ~10<sup>-11</sup> mbar) et les faire interagir avec différentes sources laser. Récemment, PIRENEA 2 a été couplée à un laser IR accordable (IR OPO) qui, combinée à la spectrométrie de masse offerte par la cellule ICR, permettra de réaliser la spectroscopie d'action des ions piégés. Dans ce contexte, le projet de thèse vise à caractériser la signature spectrale IR de plusieurs familles de nanograins carbonés cationiques (e.g. PAH<sub>n</sub><sup>+</sup> ou [PAH<sub>n</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>]<sup>+</sup>, [5]). Pour ce faire, le/la doctorant.e devra développer et valider une méthodologie capable de mesurer systématiquement les spectres d'action IR (de 2,5 à 4,5 μm) de ces nanograins préalablement tagués avec des atomes de gaz rare. Il/elle étudiera également la modification de ces spectres en fonction de la composition des nanograins ou de leur température. De plus, ces résultats seront comparés à des calculs de chimie quantique, effectués par nos collaborateurs du LCPQ, afin d'évaluer les structures des nanograins [6]. Ces nouvelles données permettront ainsi de mieux interpréter les observations réalisées avec le télescope spatial James Webb [7] par nos collaborateurs astrophysiciens de l'IRAP.

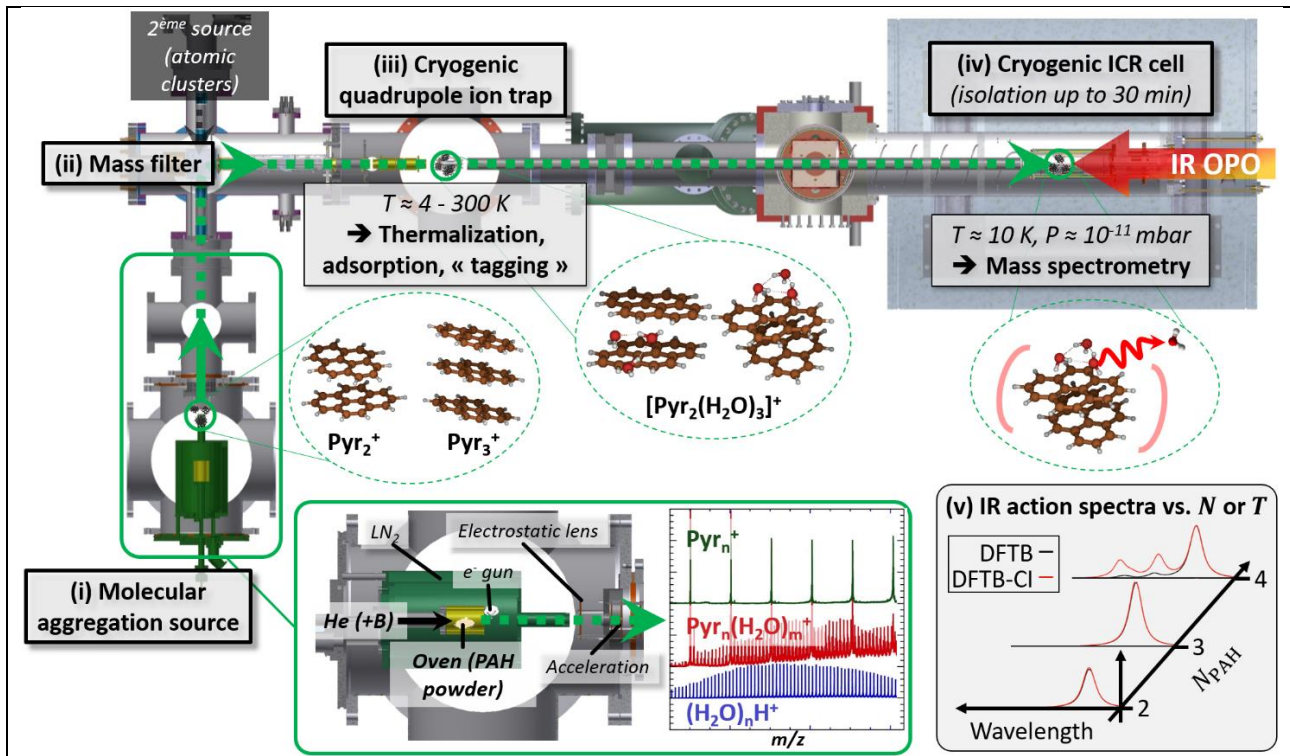


Figure 1. Principe de fonctionnement de PIRENEA 2 (développé par l'IRAP et le LCAR). Les nanograins sont (i) produits par la source d'agrégation moléculaire, (ii) sélectionnés en masse, (iii) transférés dans un premier piège à ions cryogénique où se produit l'étape d'adsorption (petites molécules ou atomes de gaz rare) et (iv) isolés dans une cellule ICR (résonance cyclotronique ionique). Cette dernière permet de mesurer, par spectrométrie de masse non destructive à haute résolution, les ions (photo-)produits en fonction de la longueur d'onde d'un OPO IR (oscillateur paramétrique optique). Ainsi, on obtient (v) le spectre d'action IR des nanograins étudiés en fonction de différentes conditions expérimentales : nombre de monomères ( $N$ ) ou température des nanograins ( $T$ ).

## Références bibliographiques

- [1] Pilleri, P. et al. *A&A* **542**, A69 (2012).
- [2] Chatterjee, K. et al. *Chem. Sci.* **9**, 2301 (2018).
- [3] Bonnamy, A. et al., PIRENEA 2 setup, [https://nanocosmos.iff.csic.es/?page\\_id=49](https://nanocosmos.iff.csic.es/?page_id=49).
- [4] Marciniak, A. et al. *hal-03752080*, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03752080>.
- [5] Zamith, S. et al. *J. Phys. Chem. A* **126**, 3696-3707 (2022).
- [6] Dontot, L. et al. *J. Phys. Chem. A* **123**, 9531-9543 (2019).
- [7] Berné, O. et al. *PASP* **134** (1035), 054301 (2022).

## Profil du candidat / de la candidate

Fort intérêt pour la physique expérimentale, la physique moléculaire, la spectroscopie en phase gazeuse ou les interactions lumière-matière. Un intérêt pour l'astrophysique ou l'astrochimie sera bienvenu mais pas indispensable.

Des connaissances complètes en physique générale (électromagnétisme, optique, électronique) et une expérience antérieure en physique/physico-chimie expérimentale est requise. Des connaissances en physique moléculaire/quantique, en spectroscopie et en chimie organique sont recommandées. Des compétences en analyse, programmation et communication sont recommandées. Des connaissances en astrophysique ou astrochimie ne sont pas nécessaires mais elles seront valorisées durant la thèse. Nous recherchons avant tout une personne motivée par la science exposée dans ce projet et qui sera capable, au terme de la thèse, d'être autonome sur un dispositif expérimental sophistiqué.

Si vous êtes intéressé.e et motivé.e. en lisant le sujet mais que vous vous dites : « je ne suis pas assez qualifié.e / expérimenté.e / ou tout autre inquiétude... », **s'il vous plaît, postulez quand même!** Nous sommes un groupe bienveillant voulant valoriser des scientifiques avec divers backgrounds.