

Titre de la thèse : Etude des collisions moléculaires d'intérêt atmosphérique et astrophysique à l'aide d'un réacteur à écoulement supersonique pulsé.

Directeur de thèse : Ian R. Sims, Institut de Physique de Rennes, Université de Rennes, France

Une connaissance détaillée des collisions moléculaires en phase gazeuse, à la fois réactives et inélastiques, est essentielle à notre compréhension des environnements naturels et artificiels, allant du froid extrême des nuages interstellaires denses aux températures élevées des flammes et aux températures intermédiaires prévalant dans les atmosphères. Dans le cadre de la subvention avancée ERC CRESUCHIRP (2016-22), nous avons développé une version optimisée de la technique Chirped Pulse in Uniform Flow (CPUF) [1], et l'avons utilisée par exemple pour étudier les collisions de HCN et de son isomère instable HNC avec He, ce qui a conduit à une publication récente dans Nature Chemistry [2]. Cette étude ouvre la voie à la recherche proposée ici.

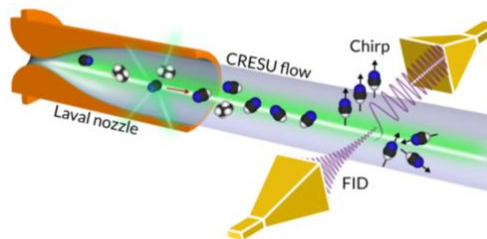


Fig. 1 La technique CPUF implémentée à Rennes

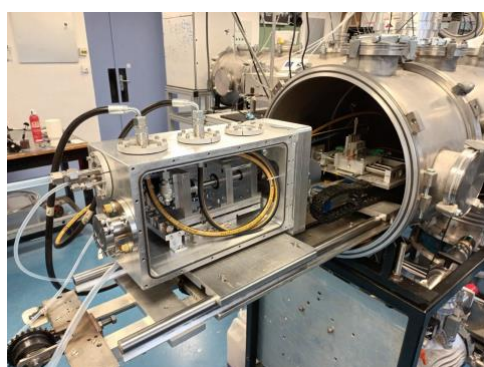


Fig. 2 Le CRESU pulsé à entraînement hydraulique

Nous aimerions utiliser la technique CPUF pour étudier la réactivité et l'excitation collisionnelle (transfert d'énergie) de molécules plus grosses et de collisionneurs plus lourds. Cependant, il existe un obstacle majeur : ces espèces nécessitent des écoulements de pression beaucoup plus faible que ce qui est actuellement possible. À la fin du projet CRESUCHIRP, nous avons pu faire la démonstration d'un CRESU pulsé basé sur une nouvelle vanne à disque rotatif actionnée hydrauliquement, permettant d'atteindre des pressions beaucoup plus basses avec une consommation de gaz considérablement réduite (O. Abdelkader Khedaoui, PhD Université de Rennes 1, Rennes, France, 2022, voir Fig. 2). L'objectif principal de ce projet de thèse est de développer

ce prototype en un instrument robuste et de l'utiliser pour étudier l'excitation collisionnelle et la réactivité qui sont très importantes non seulement pour l'espace interstellaire mais aussi pour les atmosphères des comètes et des planètes, y compris celle de la Terre, ainsi que pour les flammes, où ces informations fondamentales seront essentielles pour améliorer notre compréhension - et donc notre capacité à influencer - les processus importants impliqués dans le changement climatique et la pollution de l'air.

L'équipe de Rennes est bien connue pour ses études sur la cinétique et la spectroscopie en phase gazeuse dans des conditions extrêmes de température (de moins de 10 K jusqu'à plusieurs milliers de K) pertinentes pour les environnements astrophysiques et atmosphériques (subvention avancée de l'ERC, prix Descartes, plusieurs articles dans Science, Nature Chemistry, Phys. Rev. Letters, etc). L'équipe est particulièrement connue pour le développement de la technique CRESU (Cinétique de Réaction en Ecoulement Supersonique Uniforme) qui permet d'étudier les collisions réactives et inélastiques en phase gazeuse jusqu'à 5 K, même pour des espèces hautement condensables. Elle a permis de démontrer que de nombreuses réactions d'espèces chimiques neutres appelées radicaux (atomes ou molécules possédant un ou plusieurs électrons non appariés) avec d'autres molécules neutres deviennent en fait plus rapides à mesure que la température est abaissée, contrairement à ce que l'on pensait (pour une revue, voir réf. [3]).

Le projet sera entrepris au sein du Département de Physique Moléculaire de l'Institut de Physique de Rennes, une unité de recherche mixte du CNRS et de l'Université de Rennes située sur l'agréable campus scientifique de Beaulieu. Le département est internationalement reconnu pour ses études expérimentales et théoriques des processus élémentaires d'intérêt pour l'astrophysique, la science de l'atmosphère et la combustion, et offre un excellent environnement pour la formation doctorale. Le doctorant bénéficiera d'excellentes interactions avec l'équipe multinationale du projet CRESUCHIRP et profitera également d'un environnement technique exceptionnel construit dans le cadre du projet CRESUCHIRP, à la fois



Fig. 3 La salle CRESUCHIRP à l'IPR

en termes d'espace de laboratoire dédié et de haute qualité, ainsi que d'instruments scientifiques de haute performance construits sur mesure (voir Fig. 3).

Le poste est disponible à partir d'octobre 2023 pour une période de 3 ans. Les candidats doivent être titulaires d'un master (M2) en physique ou en chimie (physique), ou éventuellement en génie mécanique avec une spécialisation en instrumentation. Une expérience de la recherche expérimentale et notamment de l'utilisation des lasers, de la spectroscopie, des techniques de vide et d'écoulements gazeux et de l'électronique à haut vitesse serait un avantage. De bonnes capacités de communication en anglais sont essentielles, car c'est la langue de travail de l'équipe du projet CRESUCHIRP. Les demandes de renseignements et les candidatures, comprenant un CV détaillé précisant les notes obtenues, une lettre de motivation et les noms et coordonnées de deux ou trois personnes de référence, doivent être adressées au professeur Ian Sims (ian.sims@univ-rennes.fr). L'examen des candidatures commencera immédiatement et se poursuivra jusqu'à ce qu'un candidat approprié soit identifié. De plus amples informations sur l'ensemble du projet sont disponibles sur le site web du CRESUCHIRP : <https://cresuchirp.wordpress.com>

Références

1. C. Abeysekera, B. Joalland, N. Ariyasingha, L. N. Zack, I. R. Sims, R. W. Field, and A. G. Suits, *Product Branching in the Low Temperature Reaction of CN with Propyne by Chirped-Pulse Microwave Spectroscopy in a Uniform Supersonic Flow*, *J. Phys. Chem. Lett.* **6** (2015), 1599-1604
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.5b00519>
2. B. M. Hays, D. Gupta, T. Guillaume, O. Abdelkader Khedaoui, I. R. Cooke, F. Thibault, F. Lique, and I. R. Sims, *Collisional excitation of HNC by He found to be stronger than for structural isomer HCN in experiments at the low temperatures of interstellar space*, *Nature Chemistry* **14** (2022), 811-815
<https://doi.org/10.1038/s41557-022-00936-x>
3. I. R. Cooke and I. R. Sims, *Experimental Studies of Gas-Phase Reactivity in Relation to Complex Organic Molecules in Star-Forming Regions*, *ACS Earth Space Chem.* **3** (2019), 1109-1134
<https://doi.org/10.1021/acsearthspacechem.9b00064>

Mots clés : Spectroscopie micro-onde à transformée de Fourier par impulsions chirpées (CPFTMW), CRESU, cinétique des réactions à basse température, rapports de branchement des produits, réactions élémentaires, transfert d'énergie collisionnelle, excitation rotationnelle, astrophysique de laboratoire, astrochimie expérimentale, physique chimique, COMs, spectroscopie rotationnelle, chimie physique en phase gazeuse.