

Organisateurs et contacts :

Olivier Pirali, olivier.pirali@cnrs.fr, laboratoire ISMO, Orsay

Samir Kassi, samir.kassi@univ-grenoble-alpes.fr, laboratoire LIPhy, Grenoble

Tour de France de Spectroscopie Edition 2022

La spectroscopie moléculaire en phase gazeuse et à haute résolution spectrale est un outil de choix pour une grande gamme d'études et d'applications mettant en jeu des molécules neutres, radicalaires, ioniques et des complexes moléculaires isolés en phase gaz. Ces études, mêlant souvent mesures expérimentales et outils théoriques, ouvrent la route à l'amélioration des modèles de physique moléculaire, à des observations atmosphériques ou astrophysiques, ainsi qu'à des applications de détection de molécules – parfois en très faibles quantités – par exemple pour surveiller la qualité de l'air ou d'un process industriel. Or une grande variété d'outils autant instrumentaux que théoriques ont été développés par des équipes de la communauté nationale. Ces outils sont performants et souvent très complémentaires.

Nous proposons une formation à ces outils, principes et applications, à des doctorants dont le sujet de recherche est directement lié aux études de spectroscopie moléculaire à haute résolution et prioritairement en première année de thèse.

Le format et le contenu de cette formation se veulent très originaux, les étudiants ayant directement accès aux outils les plus performants de notre communauté au sein même des équipes qui les ont développés.

Au cours des étapes (limitées à un maximum de 2 jours/laboratoire) dans les laboratoires impliqués, les étudiants effectueront des Travaux Pratiques expérimentaux et théoriques qui leur permettront d'améliorer considérablement leurs compétences. De plus, pour élargir les connaissances des étudiants nous profiterons des étapes dans les laboratoires pour visiter les équipes dont l'activité n'est pas directement liée à la spectroscopie à haute résolution mais qui participent activement aux thématiques du GDR EMIE.

A la suite de ce Tour de France de la Spectroscopie, les étudiants présenteront un bilan de leur formation lors de la rencontre plénière 2022 du GDR sous forme de présentations orales et/ou quelques posters.

Cette formation portée par le GDR « Edifices Moléculaires Isolés et Environnés » (EMIE) et soutenue par l'Institut National de Physique du CNRS a reçu l'accréditation des nombreuses Ecoles Doctorales contactées (Paris, Grenoble, Dunkerque...).

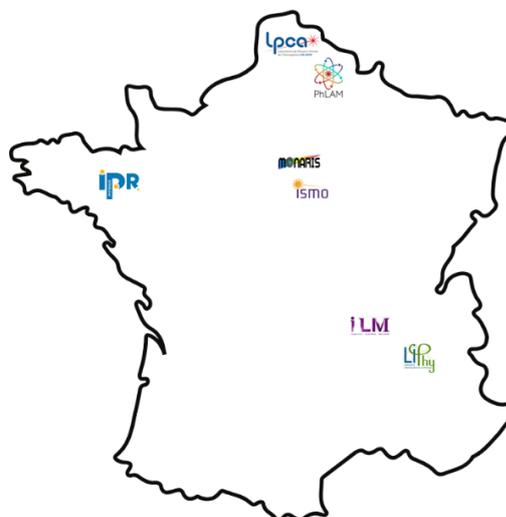


Figure 1 : Sept laboratoires partenaires accueilleront les étudiants et dispenseront des formations pratiques sur des sujets et des techniques à la pointe.

Objectifs :

L'objectif principal de la formation est d'initier les étudiants aux outils d'acquisition et d'analyse de spectres moléculaires, obtenus en phase gaz, qui présentent une structure rotationnelle résolue. Les étudiants seront directement formés par des spécialistes de 7 laboratoires Français qui ont développés un (ou plusieurs) de ces outils. La formation permettra de créer un réseau entre les différents acteurs de la formation (étudiants, formateurs, équipes d'accueil) et assurera l'attractivité, la continuité et le dynamisme de la discipline à l'échelle nationale.

Du point de vue des sujets d'étude, nous avons choisi d'aborder les problématiques liées aux systèmes moléculaires suivants : molécules de grande taille, espèces radicalaires, espèces ioniques, agrégats moléculaires, applications pour l'astrophysique, la physico-chimie des atmosphères et la santé. Ces systèmes reflètent une partie importante de l'activité de la communauté de spectroscopie à haute résolution et sont des thèmes de recherche de plusieurs laboratoires français.

Enjeux et contenu :

L'enjeu principal de cette formation est que les étudiants débutant en thèse acquièrent un socle de connaissances très solide concernant les outils instrumentaux et théoriques, développés en France concernant les études de spectroscopie moléculaire à haute résolution spectrale en phase gaz. Nous sommes persuadés que cette formation sera très bénéfique pour les étudiants, non seulement pour le bon déroulement de leur thèse mais aussi pour l'évolution de leur carrière scientifique au sein de notre communauté de physique atomique et moléculaire, qui dispose de nombreux outils techniques et théoriques. Des collaborations plus vastes émergeront entre les équipes de spectroscopie moléculaire au niveau national et la mise à disposition, via collaboration, des différents outils expérimentaux et théoriques ne manquera pas de stimuler les approches multi-techniques dynamisées par les étudiants eux-mêmes et les liens qu'ils auront pu tisser.

Les étudiants auront accès à de nombreux outils. Des lasers (infrarouge moyen, infrarouge proche et visible), des sources électroniques radiofréquence, millimétriques et submillimétriques, des techniques de génération de fréquences THz par photomélange, une présentation d'une technique de génération de longueurs d'ondes VUV par mélange à 4 ondes. Des interféromètres à Transformée de Fourier pour les sources large bande, des chaînes de détection spécifiques pour les sources monochromatiques. Des dispositifs à la pointe pour l'étude en phase des échantillons tels que les jets moléculaires, les cellules à décharge, cellules à long trajet d'absorption ainsi que des cavités optiques à ultra-haute finesse augmentant considérablement la sensibilité des instruments.

Les outils d'analyses seront : analyses spectrales graphiques de type diagrammes de Loomis-Wood, utilisation de programmes de fit des paramètres d'Hamiltoniens effectifs « génériques » de type Pickett et PGOPHER, programmes d'analyse globale de type RKR-LEVEL et DPOTfit. Outils d'analyse des formes de raies, programmes de type Fityk.

En plus des Travaux Pratiques qui seront effectués au cours de chaque étape, les étudiants assisteront à des interventions courtes qui couvriront des sujets très proches de la formation.

Durée / Coût :

La formation se déroulera sur deux semaines de 5 jours dans sept laboratoires français situés dans des régions géographiques variées (*cf.* Figure 1). Nous y séjournerons 1 ou 2 jours (voir le programme détaillé ci-après) et nous déplacerons en train d'une étape à l'autre. Les déplacements, les nuitées et les repas sont à la charge des laboratoires des étudiants sauf indication contraire explicite dans le programme ci-dessous.

Semaine 1

28 mars- **MONARIS: Laser dans le mid-IR en jet supersonique pulsé**



(P. Asselin/équipe CIRS)

- Alignement optique (croisement laser-jet, 3 voies laser sur détecteur)
- Jet supersonique pulsé (réglage vanne pulsée, pompage secondaire, préparation du mélange gazeux)
- Acquisition d'un spectre rovibrationnel froid sous LabVIEW (choix des paramètres, calibration en fréquence relative, absolue)

Voyage vers Lille et hébergement à Lille (train 18h46 Gare du Nord)

29 mars - **PhLAM: spectroscopie centimétrique**



(M. Goubet/PMI/équipe Spectro)

- TP existant « techniques spectroscopiques avancées » :
- Principes (instrumentation, spectre de rotation)
- Enregistrement de spectre et prédiction-simulation avec programmes de fit « Pickett »

Voyage vers Dunkerque et hébergement à Dunkerque (train 18h40 Gare de Lille)

30 mars - **LPCA: Spectro mmW/THz**



(A. Cuisset/équipe PCMI)

- TP existant chaîne de multiplication de fréquence mmW/sub-mmW
- Initiation à la technique de photomélangage THz

Voyage vers Rennes le 31 mars au matin (train 18h40 Gare de Dunkerque)

(Deux nuitées prises en charge par le LPCA)

31 mars - **IPR: Spectro CRDS/FT-CEAS en jet supersonique**



1^{er} avril (R. Georges, L. Rutkowski /équipe Physique Moléculaire)

- Introduction à la spectroscopie en écoulements rapides
- Acquisition des spectres hors ETL (CO₂ par CRDS en jet hypersonique)
- Acquisition des spectres en tuyère plane plasma par FT-BB-CEAS
- Fit des raies avec différents logiciels (Soft Grenoble, Fityk)
- Présentation manip peigne + transformée de Fourier

(trois nuitées prises en charge par l'IPR (samedi soir compris))

WE libre (les frais pour le retour des étudiants à leur domicile sont à la charge des laboratoires des étudiants)

Activité Kayak de mer proposée le samedi 2 avril (contact R. Georges).



<https://revenueat.fr/>

Semaine 2

4-5 avril - **ILM: Analyse spectrale, spectroscopie « électronique »**

(A. Ross, J. Morville / équipe Atmosphères, Optique et Spectroscopie Moléculaire)



- Analyse de spectre avec PGopher
- Démonstrations des programmes R. Le Roy (RKR-LEVEL et DPOTfit)
- Présentation manipulation peigne de fréquence / Vernier + fluorescence dispersée sur TF

(Repas du midi pris en charge par l'ILM)

Voyage vers Grenoble et hébergement à Grenoble (18h16 Gare de Lyon-Part-Dieu)

6-7 avril - **LiPhy: Cavités haute finesse, profils de raies, spectro « quantitative »**

(H. Fleurbaye, I. Ventrillard / équipe LAME)



- CRDS, OF-CEAS (principes, applications), fréquences absolues, lamb dips.
- TP Exp: Alignement CRDS / enregistrement de spectres. Les doigts dans l'instrument OF-CEAS, enregistrement temps réel du souffle expiré.
- TP Analyse: multifit (prog du NIST) pour dépendance en pression des shifts et élargissements. Fit Hamiltonien (Pgopher) avec les niveaux obtenus en lamb-dip. Détermination quantitative d'une série de molécules dans le souffle.

Voyage vers Orsay et hébergement à Orsay (train 16h52 Gare de Grenoble)

8 avril **ISMO: Analyse spectrale**

(M.A Martin/équipe SYSTEMAE)



- TP analyse spectres denses (micro-onde/IR) (Loomis-Wood + programmes Pickett)
- Présentation des expériences de spectroscopie THz de molécules réactives pour l'astrophysique
- Présentation de l'expérience de laser VUV (B. Gans)
- Talk de présentation de D. Comparat (Laboratoire Aimé Cotton) concernant les mesures métrologiques, le refroidissement de molécules par laser.

Fin de formation (les frais pour le retour des étudiants à leur domicile sont à la charge des laboratoires des étudiants)

Restitution par les étudiants lors de l'assemblée générale du GDR EMIE
Dunkerque, du 14 au 17 juin 2022.

