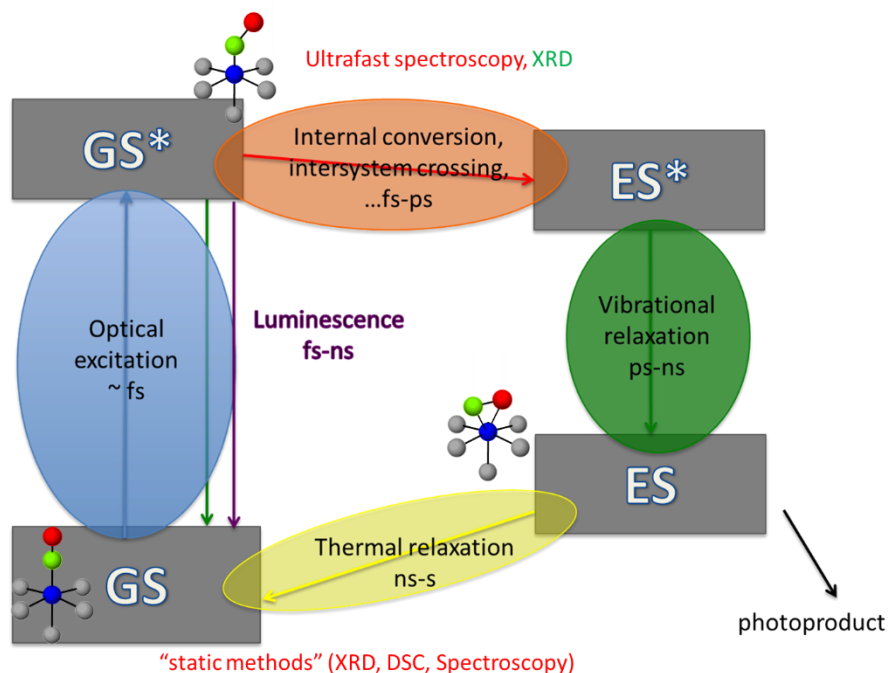


## Offre de thèse

### Dynamique structurale de complexes photoisomérisables : de la seconde à la femtoseconde

L'objectif du projet est le suivi de l'évolution structurale lors de la photoisomérisation du ligand NO de molécules photoisomérisables (voir figure ci-dessous) par diffraction de rayons X (DRX). Ceci permettra notamment de vérifier les hypothèses émises sur la bases des mesures spectroscopiques [1,2] concernant le cycle complet de l'excitation électronique de l'ordre de quelques femtosecondes jusqu'à la relaxation thermique de l'ordre de quelques millisecondes ou secondes de la photoisomérisation dans la famille des composés  $ML_5NO$  ( $m$ =métal,  $L$ =ligand). Concrètement nous allons suivre les changements structuraux lors du processus de photoisomérisation en temps réel, en déterminant les structures des états intermédiaires par DRX. Ceci nécessite des études à toutes les échelles de temps de la femtoseconde à la seconde. Nous utiliserons différents instruments à ce but : (i) Dans la gamme temporelle de ms-s ces mesures seront réalisées sur le diffractomètre du laboratoire CRM2 [3] ; (ii) dans la gamme temporelle submicrosecondes en utilisant la DRX picoseconde disponible sur les lignes synchrotrons, telle que la ligne CRISTAL au synchrotron SOLEIL ; pour les mesures les plus rapides (fs) des expériences utilisant le LASER à électrons libres (XFEL) sont envisagées.

Un deuxième aspect important de ce projet de thèse est l'amélioration de notre diffractomètre RX laboratoire afin de pousser la résolution temporelle du dispositif de la milliseconde vers la microseconde.



### Profil

Nous cherchons des candidat(e)s fortement motivé(e)s et possédant un diplôme en Physique. Cette personne devrait être à l'aise avec des techniques expérimentales, en particulier la diffraction de rayons X et la spectroscopie optique, et avec la programmation (des langages C ou python, des outils tels que LABVIEW seront utilisés). Dans le projet nous ferons appel à des grands instruments (synchrotrons et XFEL) dans différents pays, la personne devrait donc être prête à planifier et participer dans ce genre de campagnes de mesures. Les candidat(e)s devront démontrer une aisance en anglais et une envie d'effectuer des missions à l'étranger.

### Références

- [1] D. Schaniel, M. Nicoul, T. Woike, *Ultrafast reversible linkage isomerization in Na<sub>2</sub>[Fe(CN)<sub>5</sub>NO]·2H<sub>2</sub>O*, Phys. Chem. Chem. Phys. 12, 9029-9033 (2010).
- [2] G. Galle, M. Nicoul, T. Woike, D. Schaniel, E. Freysz, *Unraveling the mechanism of NO photoisomerism by time-resolved infrared spectroscopy*, Chem. Phys. Lett. 552, 64-68 (2012).
- [3] N. Casaretto, D. Schaniel, P. Alle, E. Wenger, P. Parois, B. Fournier, E.-E. Bendeif, C. Palin, S. Pillet, *In-house time-resolved photocrystallography on the millisecond timescale using a gated X-ray hybrid pixel area detector*, Acta Cryst. B73, 696-707 (2017).

### Mots clés

Diffraction en temps résolu, photocristallographie, matériaux photocommutables

### Encadrant

Dominik Schaniel, CRM2, Université de Lorraine & CNRS, Nancy, France,

Dominik.schaniel@univ-lorraine.fr

Web: [www.crm2.univ-lorraine.fr](http://www.crm2.univ-lorraine.fr)

### Candidature

Envoyez un CV avec lettre de motivation et relevés des notes de votre Master (1 et 2) ainsi qu'une lettre de recommandation de votre encadrant de stage de Master.

Date limite pour la candidature : 20 juillet 2019

Début de la thèse : 1<sup>er</sup> octobre 2019