

# La danse des molécules

## La physique ultra-rapide de l'eau

L'ionisation de l'eau liquide est un processus qui génère une myriade de phénomènes chimiques et biologiques. Les événements qui suivent immédiatement l'interaction de l'eau avec la radiation demeurent à ce jour peu connus. Ils ont pourtant une importance cruciale dans l'étude de phénomènes importants comme le bris de brins d'ADN. Dans la ville portuaire d'Hambourg en Allemagne, j'ai pu me joindre à une équipe de chercheurs du Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY), un ancien collisionneur de particules et aujourd'hui l'un des plus grands centres de recherche en physique au monde, pour tenter de pousser notre connaissance de l'eau jusque dans les plus infimes fractions de seconde suivant l'ionisation.

par Céline Larivière-Loiselle

Crédit image : Getty Image

1

L'eau est le solvant le plus répandu sur Terre et une composante majeure de tous les organismes vivants. Étant affectés quotidiennement par le rayonnement solaire, les événements qui suivent l'interaction de l'eau avec la radiation sont d'une importance majeure pour l'humain. Les fractions de secondes qui suivent l'ionisation de l'eau sont essentielles à la compréhension de nombreux phénomènes chimiques et biologiques. L'étude du mouvement des molécules durant les très courts instants suivant l'interaction de la radiation avec la matière est ce qu'on appelle la *physique ultra-rapide*.

### La physique ultra-rapide

Si vous avez déjà regardé des vidéos filmées en caméra haute vitesse, vous avez probablement pris conscience que beaucoup de choses se produisent durant une seconde, bien que tout cela nous échappe à notre perception quotidienne. Des avancées récentes en technologie laser permettent au-

jourd'hui de suivre le déroulement de réactions chimiques avec une résolution temporelle si fine qu'elle est difficile à concevoir, soit  $10^{-18}$  seconde, un milliardième de milliardième de seconde. Cette infime fraction de seconde est appelée *attoseconde* (voir **tableau 1**). Par analogie, il entre 100 millions de fois plus d'attosecondes dans une seconde que d'années dans l'âge de l'univers. Mais pourquoi s'intéresser à un si court laps de temps ?

### Les échelles de temps

La réponse est simple : le choix de l'échelle de temps est d'une importance cruciale pour l'information qu'il est possible d'extraire d'un phénomène. Considérons quelques exemples : si on veut s'attarder à la formation du système solaire, on s'intéresse à une échelle d'environ 5 milliards d'années ; la formation du grand canyon, des milliers d'années ; la démarche d'un animal, quelques minutes.

Au niveau des molécules, la

fourchette de temps pertinente est de l'ordre de la femtoseconde à la picoseconde. Les électrons, beaucoup plus légers et rapides, se déplacent sur des attosecondes. Pour étudier l'eau ionisée<sup>1</sup>, c'est donc à ces échelles de temps qu'il faut s'attarder pour analyser les molécules d'eau et l'électron qui leur est arraché. Arriver à sonder ces infimes fractions de seconde n'est cependant pas une tâche aisée. Afin d'y parvenir, les expérimentateurs et les théoriciens doivent se serrer les coudes.

**Tableau 1** : Les divisions de la seconde

Nom	Symbole	Multiple
seconde	s	1
milli-	ms	$1 \times 10^{-3}$
micro-	$\mu$ s	$1 \times 10^{-6}$
nano-	ns	$1 \times 10^{-9}$
pico-	ps	$1 \times 10^{-12}$
femto-	fs	$1 \times 10^{-15}$
atto-	as	$1 \times 10^{-18}$

1. On entend ici un système composé de plusieurs molécules d'eau dont une seule a été ionisée.

## Des électrons qui ondulent – Les FEL

### L'expérience

Il est possible d'ioniser une molécule en l'éclairant avec de la lumière. En effet, la lumière porte une certaine quantité d'énergie, proportionnelle à sa fréquence, qu'elle peut transférer à une molécule lorsqu'elle la frappe et ainsi lui arracher un électron. Pour étudier ce qui se passe ensuite, plusieurs méthodes expérimentales peuvent être utilisées en laboratoire.

### Un film spectroscopique

La spectroscopie est l'étude de l'interaction entre la matière et la radiation. Plus précisément, c'est un terme utilisé pour référer à la mesure d'un paramètre quelconque en fonction de la longueur d'onde de la lumière, donc de son énergie. En physique ultra-rapide, la spectroscopie est utilisée pour voir comment le matériau étudié évolue dans le temps. Un peu comme avec une caméra haute vitesse, les physiciens capturent des « clichés » (sous la forme de spectres) en envoyant une pulse laser qui enclenche la réaction photochimique (l'ionisation dans le cas qui nous intéresse), puis en en-

Un laser à électrons libres (ou FEL pour *Free Electron Laser*) peut produire des rayons X grâce à un phénomène appelé l'émission spontanée auto-amplifiée (ou SASE pour *Self-Amplified Spontaneous Emission*). Des petits paquets d'environ 10 milliards d'électrons sont amenés à haute énergie grâce à un accélérateur linéaire, puis passent à travers un arrangement d'aimants qu'on appelle un onduleur. L'onduleur force les électrons à suivre un parcours en zigzag, ce qui en retour génère des rayons X. Ces derniers voyagent légèrement plus rapidement que les électrons et vont donc légèrement dépasser le faisceau, accélérant par le fait même certains électrons et en décélérant d'autres. Cela va diviser le paquet d'électrons en « tranches » minces qui émettent des rayons X en phase : un procédé d'auto-amplification. C'est ainsi qu'on obtient des flashes de laser X très intenses, utiles pour plusieurs techniques expérimentales.<sup>1</sup>

voyant un second flash à différents intervalles. Dans le cas de l'eau, il est intéressant d'utiliser l'absorption des rayons X, puisque ceux-ci possèdent suffisamment d'énergie pour arracher des électrons très fortement liés aux atomes près du noyau ; on les appelle les électrons de cœur. C'est donc une méthode très utile pour sonder la structure électronique de la matière. En mesurant des spectres plusieurs fois par seconde, il est possible de voir l'évolution du système sous étude en fonction du temps, et ce, avec l'im-

pressionnante résolution de 1 attoseconde mentionnée auparavant. Avec l'aide du European XFEL, un laser à électrons libres et à rayons X (voir encadré « Des électrons qui ondulent – Les FEL ») construit sous le site du complexe de DESY, les données recueillies auront plus de détails que jamais. En effet, un seul flash laser sera si brillant qu'il permettra d'obtenir des données moléculaires avec une résolution à l'atome près.<sup>1</sup>

### La simulation

Les résultats obtenus expérimentalement ne sont pas faciles à analyser. Pour comprendre les données complexes produites en laboratoire, il est nécessaire de *simuler* la physique derrière le phénomène.

Au sein du complexe de recherche DESY se situe le centre pour l'exploitation des lasers à électrons libres (ou CFEL pour *Center for Free-Electron Laser Science*), une émanation commune de DESY, de la Société Max-Planck, et de l'Université de Hambourg, qui vise à devenir un centre à la pointe de l'exploitation des nouvelles sources de lumière de type



Le centre pour l'exploitation des lasers à électrons libres (CFEL)

Le centre de recherche DESY, qui tient pour *Deutsches Elektronen-Synchrotron*, soit synchrotron allemand à électrons, a été fondé en 1959 à Hambourg. À son inauguration en 1964, il était le plus grand complexe en son genre. Il a rapidement fait ses preuves dès 1966 en validant expérimentalement des théories de l'électrodynamique quantique. Quelques années plus tard, la renommée internationale du complexe incite les autorités à agrandir le centre par l'incorporation de DORIS en 1974 et de PETRA en 1979, deux nouveaux accélérateurs circulaires. Tous deux ont marqué leur succès avec des découvertes majeures en physique des particules : alors que le premier a permis de prouver l'existence des quarks lourds, le second a mis en évidence l'existence des gluons. L'inauguration du Grand collisionneur électron-positron entre la France et la Suisse a redirigé la physique des hautes énergies vers le CERN. Le DESY a eu l'avantage d'utiliser l'accélérateur de particules comme une source de rayons X dès 1980, se spécialisant ainsi dans le domaine. Le centre de recherche a aujourd'hui une expertise dans le développement d'accélérateurs de particules, la physique subatomique et la science photonique.<sup>3</sup>



lasers d'électrons libres. C'est au cœur de ce centre que travaille l'équipe de recherche du Pr. Robin Santra à développer des outils théoriques et informatiques pour prédire le comportement de la matière exposée à un rayonnement électromagnétique intense. Les programmes informatiques qu'ils ont développés permettent de décrire la physique ultra-rapide suivant l'ionisation de la matière par des rayons X. J'ai eu la chance de brièvement me joindre à cette équipe pour en apprendre d'avantage sur la physique ultra-rapide de l'eau suivant l'ionisation.

### L'impact de l'électron

Utilisant les outils développés par le groupe<sup>2</sup>, j'avais pour mission d'étudier l'impact de l'électron sur la dynamique de l'eau. En effet, la question se pose à savoir : qu'advient-il de l'électron lorsqu'il est arraché à une molé-

cule d'eau? Est-ce qu'il est projeté très loin ou reste-t-il près de la molécule d'eau chargée positivement, influençant sa dynamique? Il y a de bonnes raisons de croire que l'électron va rester dans les environs de la molécule d'eau d'où il provient s'il est ionisé par un laser à électrons libres. Sa présence pourra alors avoir un impact sur la façon dont l'eau évolue durant les instants qui suivent l'interaction avec la radiation.

En utilisant des équations fondamentales de la physique et en faisant certaines approximations, on peut simuler différents résultats, comme par exemple les spectres d'absorption de rayons X mentionnés plus tôt. On peut par la suite comparer ces résultats avec des expériences pour valider le modèle théorique utilisé, ce qui permet de mieux comprendre la physique sous-jacente à l'expérience en question.

La science est faite de petites contributions, et je suis heureuse d'avoir pu apporter la mienne à la physique ultra-rapide de l'eau.

### Références

1. *50 years of DESY*. Brochure, 2009.
2. Yajiang Hao and al. *Efficient electronic structure calculation for molecular ionization dynamics at high x-ray intensity*. *Structural dynamics* 2, (041707), 2015.
3. DESY. *Insight starts here*. Desy website, 2018. URL [http://www.desy.de/about\\_desy/desy/index\\_eng.html](http://www.desy.de/about_desy/desy/index_eng.html).