



## SEMINAIRE ISMO

**Laurent COUDERT**

*Le LISA (Laboratoire Inter-universitaire des Systèmes Atmosphériques),  
UMR CNRS 7583 universités Paris-Est Créteil*

### **Approches théoriques destinées aux molécules non-rigides : application à la spectroscopie et au contrôle torsionnel**

Les molécules non-rigides, présentant des mouvements de grande amplitude, ne relèvent pas de l'approximation harmonique et nécessitent des approches dédiées pour rendre compte de leurs niveaux d'énergie. Au cours de l'exposé, quelques effets nouveaux impliquant des molécules non-rigides seront décrits ainsi que leur prise en compte.

La rotation interne d'un groupe méthyle est un exemple bien connu de mouvement de grande amplitude. Cette torsion, bien caractérisée dans le cas d'un groupe méthyle symétrique  $\text{CH}_3$  ou  $\text{CD}_3$ , a été beaucoup moins étudiée dans le cas d'un groupe méthyle asymétrique partiellement deutéré  $\text{CH}_2\text{D}$  ou  $\text{CD}_2\text{H}$ . On tentera de comprendre en quoi ce deuxième type de torsion diffère du premier et comment le traiter. Des résultats relatifs au spectre haute-résolution de plusieurs molécules d'intérêt astrophysique, où une rotation interne d'un groupe méthyle asymétrique a lieu, seront exposés.

La structure hyperfine, de nature quadrupolaire ou magnétique, de molécules non-rigides revêt d'un intérêt tout particulier quand un mouvement de grande amplitude échange des atomes équivalents à l'origine du couplage hyperfin. Dans le cas de la molécule non-rigide de méthanol, il faut ajouter à ce moyennage un couplage hyperfin magnétique, spécifique aux molécules non-rigides, résultant du champ magnétique généré par la rotation interne du groupe méthyle. Une des premières tentatives de mise en évidence de ce couplage, grâce au spectre micro onde du méthanol, sera présentée.

Le contrôle cohérent des degrés de liberté moléculaire interne ou externe peut s'effectuer à l'aide de champs lasers intenses ou de pulses térahertz. Quand le degré de liberté interne auquel on s'intéresse est un mouvement de grande amplitude, il faut pour modéliser le processus de contrôle être à même d'évaluer les niveaux d'énergie de la molécule en traitant simultanément la rotation globale, le mouvement de grande amplitude et les effets du champ électrique. On verra pour plusieurs molécules non-rigides le degré d'alignement torsionnel obtenu par un tel calcul.

**Mardi 15 décembre à 11h**

**Bât 351 – 2<sup>ème</sup> étage (Bibliothèque)**

**Université Paris-Sud - 91405 ORSAY Cedex**