

## Soutenance de thèse

**Caroline ELKHARRAT**

*ISMO (Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay), Orsay*

### **Dynamique de photoionisation et de photofragmentation de petites molécules non-linéaires : du rayonnement synchrotron aux impulsions lasers femtosecondes.**

La photoionisation (PI) des molécules non-linéaires  $\text{CH}_3\text{Cl}$ ,  $\text{CF}_3\text{I}$  et  $\text{NO}_2$  a été étudiée par la méthode des corrélations vectorielles, ou spectroscopie en coïncidence des vecteurs vitesses électron-ion(s). Je présenterai les principaux résultats obtenus dans l'étude expérimentale des réactions de PI en couches internes C 1s et Cl 2p de la molécule  $\text{CH}_3\text{Cl}$  induites par rayonnement synchrotron X-mou (BESSY) d'une part, et de celles en couche de valence des molécules  $\text{CF}_3\text{I}$  et  $\text{NO}_2$  induites par excitation multiphotonique auprès de sources lasers femtosecondes (SLIC Saclay), d'autre part. Pour ces molécules non-linéaires, la sélection des voies de photoionisation dissociative (DPI) permet de déterminer la distribution angulaire des photoélectrons dans le référentiel de recul de la molécule (RFPAD) pour chaque chemin réactionnel identifié : cette observable permet le test le plus sensible des moments de transition caractérisant la dynamique de photoionisation. Leur extraction des distributions angulaires mesurées s'appuie sur un formalisme unifié développé par R. Lucchese (Texas A&M) pour la PI de molécules de symétrie  $C_{2v}$  et  $C_{3v}$ .

Pour les réactions de PI C 1s<sup>-1</sup> et Cl 2p<sup>-1</sup> de la molécule  $\text{CH}_3\text{Cl}$ , les RFPADs pour la voie dominante conduisant à la production des fragments ( $\text{CH}_3^+$ ,  $\text{Cl}^+$ ) après ionisation et déclin Auger, ainsi que les voies ( $\text{H}_3^+$ ,  $\text{CCl}^+$ ) et ( $\text{H}^+$ ,  $\text{ClCH}_2^+$ ), constituent différentes moyennes du diagramme de photoémission dans le référentiel moléculaire (MFPAD). La contribution de l'ionisation des orbitales 2p quasi-dégénérées de symétrie  $a_1$  et  $e$  sera illustrée pour la voie ( $\text{CH}_3^+$ ,  $\text{Cl}^+$ ) en comparant les RFPADs mesurées aux calculs de type frozen-core Hartree-Fock (FCHF) de R. Lucchese et al.

Pour les processus d'ionisation multiphotonique dissociative (MDPI), l'analyse de la distribution angulaire des ions produits a permis de proposer un chemin réactionnel pour le processus d'absorption entre états liés intermédiaires quasi-résonnants qui précède le processus d'ionisation. La formation de paires d'ions ( $\text{NO}^+$ ,  $\text{O}^-$ ) constitue une voie remarquable dans la photoexcitation multiphotonique de  $\text{NO}_2$  autour de 400 nm.

**ATTENTION DATE ET HEURE INHABITUELLES**

**jeudi 7 octobre 2010 à 9h30**

*Bât 351 - 2<sup>ème</sup> étage*

*Université Paris-Sud 91405 ORSAY Cedex*

*La soutenance sera suivie d'un pot auquel vous êtes chaleureusement invités*