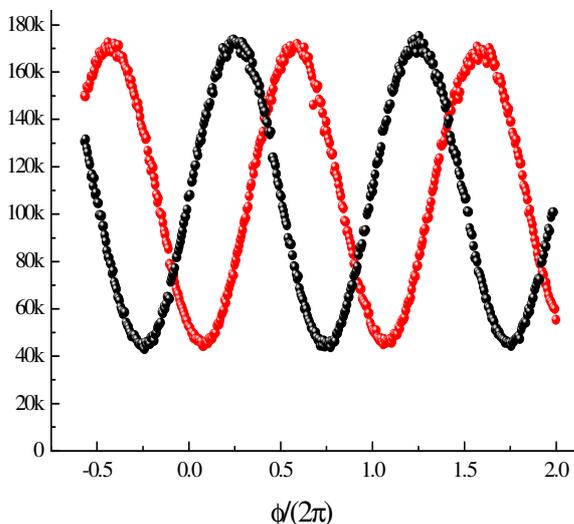
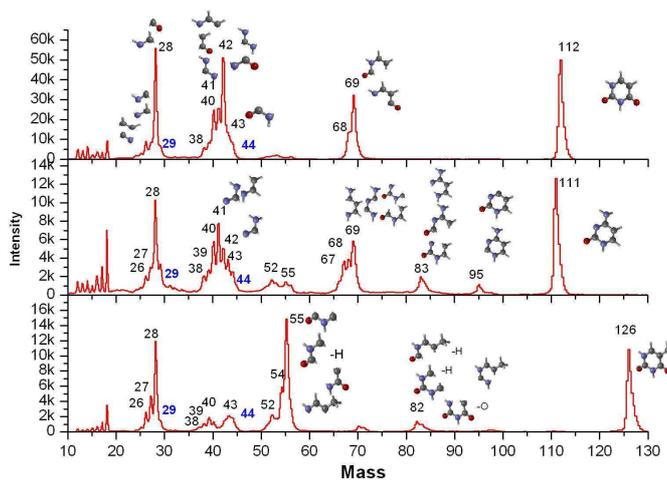
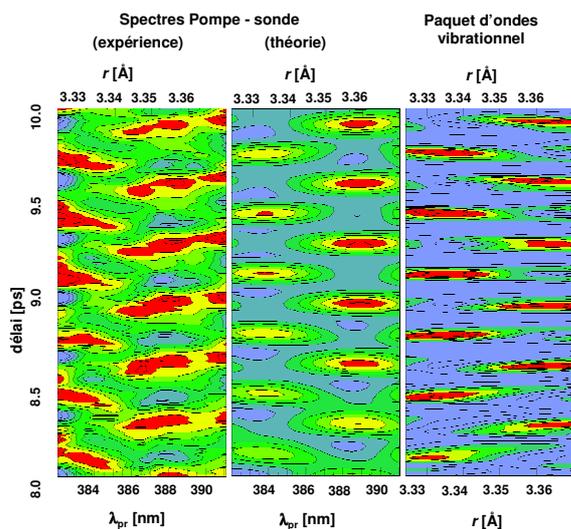


Laboratoire Collisions, Agrégats, Réactivité
UMR 5589 (CNRS – Université Paul Sabatier Toulouse 3)

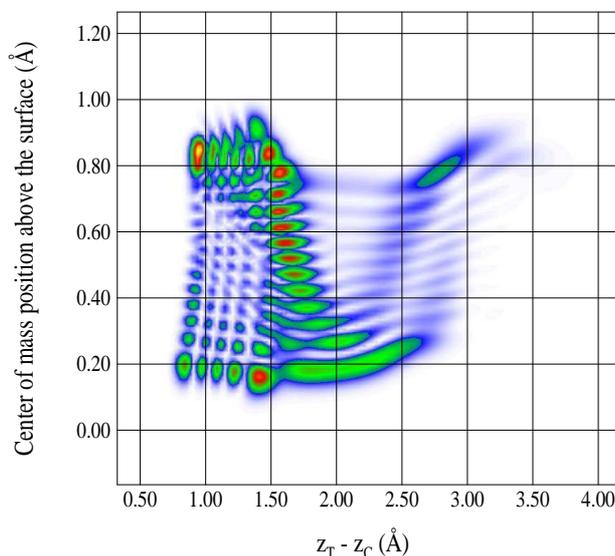
appartenant à
l'IRSAMC - Fédération de Recherche de Physique et Chimie Fondamentales (FR 2568)

Rapport d'activité

2002-2005



Eigenstate 106 (0.832 eV, 0.10 ps)



Légendes de la page 1 de couverture

Haut – gauche : Réseau d'ondes stationnaires transitoires résultant de l'interférence de deux paquets d'onde se croisant dans un puits de potentiel moléculaire (coll. Equipes « Théorie », « Femtos » et K. Ohmori (IMS, Okazaki)).

Haut – droit : Spectres de fragmentation de l'Uracil, Cytosine et Thymine par collisions de protons de 100 keV d'énergie.

Bas – gauche : "Franges d'interférences atomiques avec le lithium : l'application d'un champ électrique sur un seul des faisceaux atomiques dans l'interféromètre introduit un déphasage entre la courbe noire ($E = 0$) et la courbe rouge ($E = 6 \times 10^4$ V/m) et ces signaux donnent une valeur très précise de la polarisabilité atomique."

Bas – Droit : Piégeage et dissociation de H_2 (ici, l'isotope tritium) sur des surfaces carbonées. Cas dissociatif : état ($n=4$, $N=14$) avec beaucoup d'énergie ($n=4$) dans la vibration interne T-C, "fuyant" dans le continuum (sommet de la barrière à $z = 1.8$ Å).

Table des matières

1. Organigramme de l'Unité.....	3
2. Message du Directeur de l'Unité.....	7
3. Structure, dynamique et thermodynamique des agrégats.....	21
4. Optique pour tests fondamentaux.....	43
5. Manipulation d'atomes par champs proches issus de nanostructures.....	79
6. Spectroscopie moléculaire ultrarapide et contrôle cohérent.....	91
7. Spectrométrie d'électrons dans les collisions.....	125
8. Interactions Ion-Surface.....	143
9. Théorie des processus dynamiques dans les systèmes moléculaires.....	153
10. Collisions froides électron-molécules à haute résolution avec des photoélectrons synchrotron.....	173
11. Publications de l'ensemble du laboratoire.....	179
12. Les collaborations du LCAR.....	207
13. Bilan financier.....	213
14. Bilan sur l'évolution du personnel de l'Unité.....	219
15. Responsabilités exercées par les membres du LCAR.....	229
16. La formation dans l'Unité.....	233
17. Hygiène et sécurité.....	235
18. Séminaires 2002-2005.....	239

2.2. Actions d'ouverture vers le grand public

Les chercheurs du laboratoire se sont fortement investis dans l'organisation de l'Année Mondiale de la Physique. Plusieurs d'entre eux sont membres fondateurs de l'association « Physique 2005 en Midi-Pyrénées ». En particulier, Cécile Robilliard en est la trésorière. Bruno Lepetit a été responsable d' « Objectif Physique » (semaine de la Physique à l'Université Paul Sabatier), Carlo Rizzo a organisé l'exposition « Voyage au Centre de la Physique ». Cécile Robilliard a organisé la semaine de la physique à Rodez. Arnaud Le Padellec a coordonné les journées portes-ouvertes de l'IRSAMC. De nombreuses expériences de démonstrations ont été réalisées par Béatrice Chatel et Cécile Robilliard. Bien d'autres ont également participé par des aides plus ponctuelles.

De ce fait, le budget de l'association a été entièrement géré par le laboratoire, entraînant un surcroît de travail au secrétariat et aussi des reliquats importants pour la fin 2005 (toutes les subventions ont été reçues en 2005 alors que les manifestations sont prévues jusqu'à l'été 2006). Des expositions ont été organisées tout au long de l'année dans les 8 départements de la Région, avec une forte participation de tous les personnels du laboratoire en particulier les ITA.

2.3. Animation de la communauté scientifique

Les personnels du laboratoire se sont fortement impliqués dans l'organisation de COLOQ'8 – Horizons de l'Optique en septembre 2003 (J. Vigué, F. Lozes (LAAS) responsables) qui a attiré plus de 300 participants. D'autres manifestations scientifiques ont aussi été organisées par le laboratoire.

- Ecole d'été "Coherent Control in atomic and Molecular systems", Cargèse, Octobre 2002 (B. Girard)
- Colloque "Quantum Vacuum and the search for New Forces", Les Houches juin 2005 (C. Rizzo, A. Lambrecht, D. Bakalov)
- Ecole Franco-Syrienne « Laser-matter interaction », Université d'El Baath, Homs, 15-20 novembre 2005 (M. Aziz Bouchène)

2.4. Ressources humaines

Créé en 1992 par fusion entre le Laboratoire de Collisions Atomiques de Toulouse et la Jeune Equipe « Dynamique des Edifices Atomiques », dans le cadre d'une opération de décentralisation menée en concertation entre le MENESR, le CNRS et l'Université Paul Sabatier. Le LCAR a évolué sous l'effet de mutations successives et de recrutements pour une large fraction d'extérieurs au laboratoire. Sur les 24 chercheurs et enseignants-chercheurs présents en octobre 2005, il faut noter que 4 chercheurs CNRS et 1 professeur sont arrivés par mutation alors que 8 chercheurs CNRS y ont été recrutés sur leur premier poste permanent. Sur ces 24 personnes, seulement 6 d'entre eux ont soutenu leur thèse à Toulouse.

L'évolution des effectifs est la suivante :

3. Structure, dynamique et thermodynamique des agrégats

3.1. Composition de l'équipe

Responsables :

Pierre Labastie jusqu'au 01/2005

Jean-Marc L'Hermite depuis le 02/2005

Permanents :

Arnaud Le Padellec, Maître de conférence, jusqu'au 31/07/2004

Sébastien Zamith, CR2, depuis le 01/10/2004

Pierre Labastie, Professeur

Jean-Marc L'Hermite, Chargé de recherche

Doctorant :

M./Mme	Prénom	Nom	Financement	Arrivée	Départ
M.	Fabien	Chiot	Bourse ministère, moniteur	01/09/04	

Visiteur :

M./Mme	Prénom	Nom	Université	Financement	Arrivée	Départ
M	Martin	Schmidt	Paris XI, LAC	LCAR	21/06/2004	25/06/2004

Stagiaires (maîtrise, magistère, DEA, Ecoles, autres)

M./Mme	Prénom	Nom	Université/Ecole	Niveau	Arrivée	Départ
M	Cyril	Jaudet	Toulouse	L3	05/2004	07/2004
M	Nicolas	Renaud	Toulouse	L3	05/2004	07/2004
Melle	Marie-Laure	Christiaens	Toulouse	M1	05/2004	07/2004
M	Mounir	El Beiyad	Cachan	Magistère	06/2004	07/2004
M	Fabien	Chiot	Bordeaux	DEA	04/2004	07/2004
M	Florent	Malavelle	Toulouse	M1	05/2005	07/2005
M	Nicolas	Mercier	Orsay	L3	06/2005	07/2005

3.2. Compte-rendu de l'activité scientifique

Depuis sa création jusqu'au début de la période considérée ici, l'équipe « agrégats » du LCAR s'était consacrée à l'étude d'agrégats mixtes de métaux halogénés, par des techniques de spectroscopie laser et de spectrométrie de masse. Ce volet de son activité s'est achevé (peut-être provisoirement) par une étude de la dynamique à l'échelle femtoseconde d'un petit agrégat de fluorure de sodium, Na_3F , réalisée en collaboration avec l'équipe *Spectroscopie moléculaire ultrarapide et contrôle cohérent* et le soutien théorique, notamment, de M.C. Heitz (LPQ/IRSAMC). Nous avons montré que l'excitation électronique de cet agrégat par une impulsion ultra-brève de longueur d'onde bien choisie induisait une oscillation entre deux géométries se traduisant par une variation périodique du signal de photoionisation détecté par une seconde impulsion ultra-brève.

Après cette fructueuse collaboration, nous avons décidé de nous orienter vers un sujet d'apparence simple mais qui n'avait jamais été abordé expérimentalement à l'échelle des agrégats : la nucléation. Notre but est de caractériser les étapes successives de la construction d'un agrégat, depuis le dimère jusqu'à un objet d'une ou plusieurs centaines d'atomes. Nous avons pour cela conçu une nouvelle expérience afin de mesurer les sections efficaces de collage d'un atome sur un agrégat en fonction de plusieurs paramètres : la taille de l'agrégat, sa température et l'énergie de collision. Les agrégats produits seront analysés évidemment en taille mais aussi en température, par des mesures de taux de dissociation. Nous envisageons également de caractériser la phase thermodynamique (solide ou liquide) des réactants et des produits. Ce dispositif expérimental original est aujourd'hui en phase finale de mise au point. Il est d'ores et déjà suffisamment performant pour envisager les premières expériences de collage.

Les premières expériences seront consacrées à la nucléation d'agrégats de sodium, système modèle bien connu, aussi bien expérimentalement que théoriquement. Les mesures viseront d'abord à caractériser l'évolution de la section efficace de collage avec la taille. Nos calculs préliminaires prédisent d'une part des variations fines d'une taille à l'autre (dues à des effets de remplissage de couches électroniques, comme pour le potentiel d'ionisation et l'énergie de dissociation), d'autre part une évolution moyenne en fonction de la taille en $N^{1/2}$, différente de celle généralement supposée, proportionnelle à la surface de l'agrégat, en $N^{2/3}$. Nous mesurerons également les taux de dissociation des produits formés, reliés à leur température.

Ces résultats seront analysés à plusieurs niveaux : premièrement, dans le cadre des théories statistiques microscopiques qui décrivent la dissociation des agrégats (de type RRKM, PST,...), phénomène intimement lié au processus de collage dans l'hypothèse de microréversibilité ; deuxièmement, dans le cadre des modèles classiques de nucléation, de nature plus macroscopique, qui décrivent la formation de particules à partir d'un gaz. Ces derniers modèles, destinés à prédire notamment les taux de nucléation (avec un succès mitigé sur le plan quantitatif...), sont fondés sur la thermodynamique classique et utilisent des notions macroscopiques telles que la tension de surface. A partir de ces deux approches, nous tenterons de jeter un pont, comme souvent en physique des agrégats, entre les aspects microscopiques et macroscopiques de la nucléation. Il nous sera possible, à titre d'exemple, de mesurer directement un paramètre-clé de tous les modèles classiques de nucléation, la « taille critique », pour laquelle le taux de collage égale le taux d'évaporation. Cette taille critique N_c , bien qu'invoquée dans un modèle macroscopique, se situerait paradoxalement souvent dans le domaine microscopique, échelle à laquelle la théorie n'est pas valide ! Enfin, nous tenterons (la technique de mesure reste à valider expérimentalement) de déterminer la phase thermodynamique des agrégats incidents et produits par des mesures conjointes de leurs taux de dissociation. Il serait possible, selon des calculs préliminaires, d'observer des

phénomènes originaux tels la formation d'un agrégat solide après collage d'un atome sur un agrégat liquide.

Après le système modèle qu'est le sodium, nous passerons à l'étude, plus délicate mais d'une portée pratique plus évidente, de la nucléation de l'eau. Par les méthodes validées sur le sodium, nous mesurerons les sections efficaces de collage de molécules d'eau sur des agrégats d'eau pure ou hétérogènes. Nous avons décidé d'étudier ce système en raison de son intérêt en physique atmosphérique : la formation des nuages est évidemment conditionnée par le taux de nucléation de l'eau. Ce sujet jouit d'une recrudescence d'intérêt depuis quelques années, surtout en ce qui concerne les cirrus stratosphériques polaires (dénommés *PSC* pour *Polar Stratospheric Clouds*), en raison de leur impact sur le climat global. Or, le phénomène de nucléation de l'eau dans les nuages est très mal décrit, surtout dans son stade initial, lorsque les particules sont encore microscopiques. Il en résulte des différences par de nombreux ordres de grandeur entre mesures et prédictions, concernant les taux de nucléation par exemple. Les acides sulfuriques et nitriques semblent jouer un rôle important dans la formation et la composition des particules d'eau constituant les *PSC*. C'est pourquoi nous étudierons les agrégats non seulement purs mais aussi de type $(\text{H}_2\text{O})_n(\text{HNO}_3)_p$ et $(\text{H}_2\text{O})_n(\text{H}_2\text{SO}_4)_q$.

Parallèlement à ces travaux essentiellement expérimentaux, P. Labastie a abordé depuis deux ans un problème purement théorique. Il s'agit de caractériser la topographie des surfaces de potentiel des agrégats en utilisant comme variables de calcul les distances interatomiques plutôt que les coordonnées cartésiennes habituelles. On espère ainsi une vision différente du « paysage » énergétique des surfaces de potentiel. En particulier, on a obtenu une explication qualitative de la forme de la courbe donnant l'entropie en fonction de l'énergie pour des petits agrégats, qui pourrait expliquer certains aspects de la transition solide—liquide dans les agrégats.

Nous allons détailler dans la suite en quatre volets l'activité de l'équipe : les expériences aujourd'hui achevées de dynamique femtoseconde, les expériences en cours de collage, le projet d'étude de nucléation de l'eau, et l'étude théorique des transitions de phase dans les agrégats.

3.2.1. Dynamique femtoseconde de l'agrégat Na_3F

*Ce travail a été fait en collaboration avec l'équipe « femtoseconde » du LCAR
publication n°3*

Les expériences de type pompe-sonde utilisant des impulsions laser ultra-brèves, appliquées à des systèmes moléculaires parfois assez complexes, sont aujourd'hui monnaie courante. Elles servent à caractériser la dynamique de ces systèmes à l'échelle temporelle de la vibration moléculaire, et parfois même à contrôler cette dynamique. Cependant, sauf dans le cas de systèmes particulièrement simples (atomes ou molécules diatomiques), l'information recueillie se résume en général au taux de décroissance (ou de croissance) d'un phénomène induit par l'impulsion « pompe » : création d'ions (ou d'électrons), dissociation... Dans nos expériences sur l'agrégat Na_3F , nous avons observé, outre une décroissance, des oscillations temporelles qui sont une signature de la dynamique vibrationnelle du système excité. L'interprétation du signal pompe-sonde a nécessité une étude de l'agrégat Na_3F par spectroscopie de photodépopulation « traditionnelle ». La simulation par propagation de paquets d'onde, réalisée par M.C. Heitz (Laboratoire de Physique Quantique, UMR 5626, Toulouse), a mis en évidence l'origine des oscillations observées : elles résultent du mouvement quasi-périodique, induit par l'impulsion pompe, de l'atome de fluor, mouvement qui module le potentiel d'ionisation du système et donc le signal d'ions détectés.

3.2.1.1. Principe de l'expérience pompe-sonde

Les agrégats Na_3F sont produits par notre source à vaporisation laser et triés en masse par temps de vol. Les impulsions laser ultra-brèves, accordables sur une petite plage spectrale, sont délivrées par les deux NOPA (Non Collinear Optical Parametric Amplifiers) de l'équipe « femtoseconde ». Bien que sa mise en œuvre soit très délicate, le principe de l'expérience est extrêmement simple : les faisceaux des deux impulsions femtoseconde sont confondus et focalisés sur la zone d'ionisation du spectromètre de masse et le signal d'ions produits à la masse de Na_3F est enregistré en fonction du décalage temporel entre les impulsions pompe et sonde.

3.2.1.2. Spectroscopie de l'agrégat Na_3F

Les deux isomères les plus stables de Na_3F (voir *Figure 1*) ont quasiment la même énergie ; l'un est plan, de symétrie C_{2v} (isomère 1 dans la suite), l'autre a une forme de pyramide, de symétrie C_{3v} (isomère 2 dans la suite). Nous avons mesuré le potentiel d'ionisation par spectroscopie d'ionisation à un photon, et déterminé les bandes d'absorption par spectroscopie de photodépopulation. Les spectres obtenus sont présentés sur la *Figure 2*. Il apparaît clairement, par comparaison avec un spectre d'absorption théorique calculé par G.Durand (LPQ, UMR 5626, Toulouse), que c'est l'isomère 1 que nous excitons.

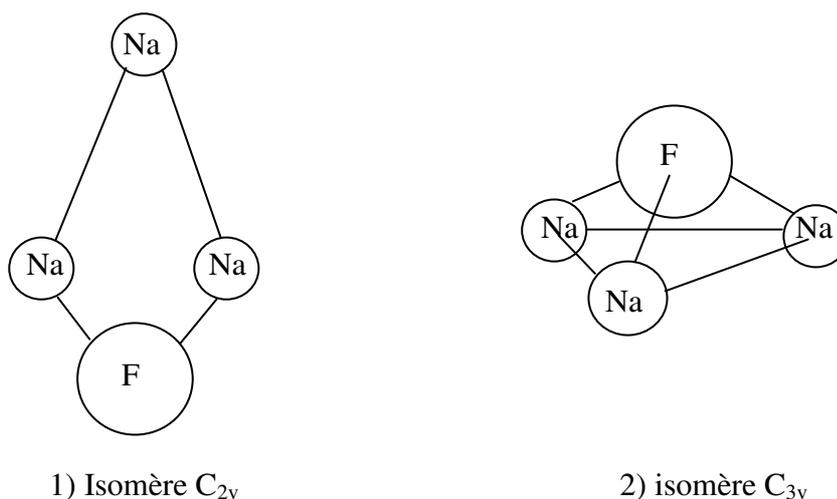


Figure 1 : Les deux isomères les plus bas de Na_3F . Le potentiel d'ionisation vertical de l'isomère 1 est 4.95 eV, celui de l'isomère 2 est 4.44 eV.

3.2.1.3. Expérience pompe-sonde femtoseconde

Les expériences pompe-sonde ont été menées avec une impulsion pompe à 510 nm (2.43 eV) et une impulsion sonde à 600 nm (2.05 eV). L'impulsion pompe excite l'isomère 1 de Na_3F dans l'état 1^1B_1 , responsable de la bande d'absorption centrée à 2.5 eV (voir *Figure 2*), tandis que l'impulsion sonde l'ionise à partir de cet état excité, après évolution du système. La somme des énergies des impulsions pompe et sonde (2.43+2.05=4.48 eV) est choisie au seuil, c'est-à-dire qu'elle permet d'ioniser certaines géométries et pas d'autres (par exemple, on ionise l'isomère 2 mais pas le 1) ; c'est cette caractéristique, essentielle, qui transfère l'information de mouvement en variation du signal d'ions. Le signal d'ions détectés en fonction du décalage temporel entre pompe et sonde est représenté sur la *Figure 3* : le signal oscille avec une période de 390 ± 10 fs, et décline avec un temps $\tau = 1275 \pm 75$ fs.

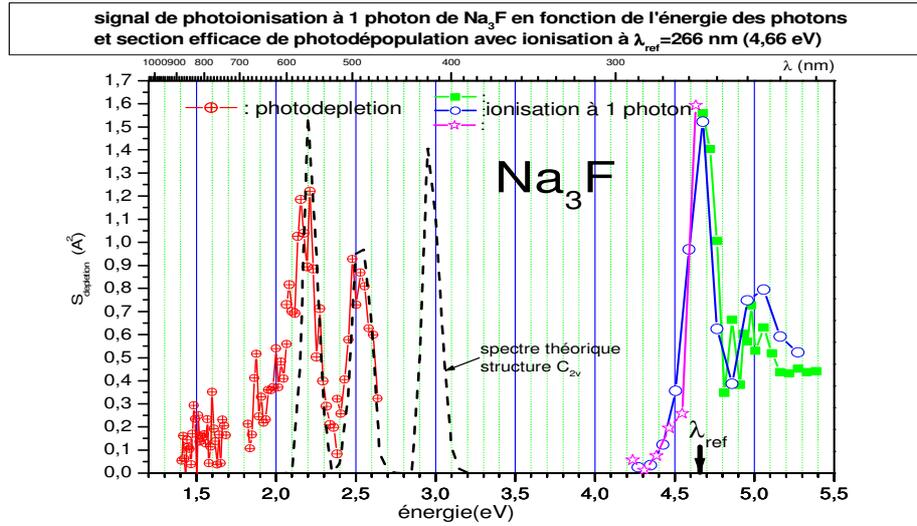


Figure 2 : Spectres d'ionisation et de photodépopulation de Na_3F . Le spectre théorique de l'isomère 1, représenté en pointillé, s'accorde bien avec l'observation.

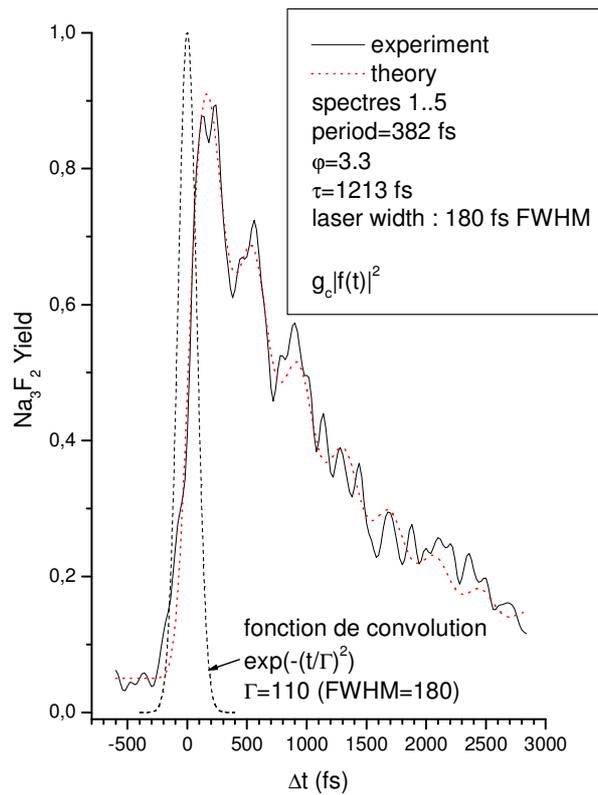


Figure 3 : Signal d'ions Na_3F_2 obtenus en fonction du délai pompe-sonde Δt . Le signal expérimental est en trait plein. Il résulte de la moyenne de 5 spectres enregistrés dans les mêmes conditions. Le signal théorique est en pointillé. La « fonction de convolution », également en pointillé, est la fonction de corrélation croisée des impulsions pompe et sonde ; elle représente la résolution temporelle de l'expérience.

Les simulations numériques de M.C. Heitz¹ ont permis de comprendre l'origine de ce comportement. Examinons chronologiquement ce qui se passe. A $\Delta t=0$, l'agrégat est dans l'état électronique fondamental, dans la géométrie de l'isomère 1. L'impulsion pompe l'excite dans l'état 1^1B_1 . Il ne peut à ce stade être ionisé par l'impulsion sonde puisque le PI vertical de l'isomère 1 excède la somme des énergies des deux impulsions. Cependant, la géométrie d'équilibre de l'état excité est différente de celle de l'état fondamental, l'atome de fluor y est plus proche des atomes de sodium. Le système commence donc à évoluer vers cette géométrie en rapprochant l'atome de fluor du triangle formé par les 3 atomes de sodium. Lorsque le fluor passe entre les deux sodium les plus proches, les calculs montrent que le PI est alors suffisamment bas pour que l'impulsion sonde puisse ioniser le système : on détecte donc des ions Na_3F^+ . Puis le fluor continue son mouvement vers le centre du triangle de sodium, où il ne peut à nouveau plus être ionisé. Repoussé par le sodium qui se trouve en face de lui, il rebrousse chemin pour atteindre à nouveau la géométrie « ionisable », et ce mouvement se répète. On a donc une oscillation entre deux isomères dont l'un peut être ionisé et l'autre pas. C'est ce mouvement qui est responsable de la variation d'amplitude du signal d'ions détectés avec une période de 390 fs. Ce mouvement s'amortit au cours du temps par IVR (Internal Vibrational Relaxation): à chaque aller-retour, il y a un transfert d'énergie cinétique entre ce mode de vibration et d'autres modes de vibration, notamment symétriques et antisymétriques du triangle Na_3 . Au bout d'un certain temps, le système est piégé dans une géométrie non ionisable dans laquelle le fluor est plus ou moins au centre du triangle de sodium. D'autre part, l'énergie disponible est suffisante pour que le système se dissocie par éjection d'un atome de sodium. Ce sont donc à la fois le piégeage dans un état noir et la dissociation qui sont responsables du déclin du signal d'ions.

3.2.2. Expérience de collage appliquée au sodium

Des expériences de fragmentations sont depuis longtemps menées sur les agrégats. Récemment, on a utilisé les variations du taux de dissociation avec la température des agrégats pour réaliser des expériences de nanocalorimétrie (H.Haberland à Freiburg²). Ces expériences, encore en cours de développement, permettent de sonder, à un niveau fondamental, les propriétés thermodynamiques des systèmes finis. Un résultat remarquable a été la démonstration de capacités calorifiques négatives au voisinage de la transition solide-liquide dans les petits systèmes. Les transitions de phase dans ces systèmes finis (il s'agit d'agrégats de quelques dizaines ou centaines d'atomes) est en fait mal comprise à l'heure actuelle. Des questions fondamentales ont été soulevées, notamment sur la validité du principe de microréversibilité que l'on postule dans la description statistique de ces phénomènes. Ce principe stipule que la probabilité d'évolution d'un état non dissocié donné vers un état dissocié donné est exactement la même que celle du processus inverse. La grande majorité des modèles utilisés actuellement (RRKM, Weisskopf, Phase Space Theory), dont dépend la validité des résultats cités au paragraphe précédent, supposent les systèmes microréversibles. Les ingrédients essentiels de ces modèles de fragmentation sont :

- La densité d'états du parent
- La densité d'états du fragment
- Le taux d'évaporation
- La section efficace de collage σ pour les modèles microréversibles

Les deux premières quantités peuvent être obtenues par des expériences de nanocalorimétrie.

¹ M.C.Heitz, G.Durand, F.Spiegelman, C.Meier, R.Mitric, V.Bonacic-Koutecky, J.Chem.Phys. 121 (20), 9906 (2004)

² R. Kusche, Th. Hippler, M. schmidt, B.von Issendorf, H. Haberland, Eur. Phys. J. D 9, 1 (1999)

Il existe aussi de nombreuses mesures de taux d'évaporation. **Par contre, il n'y a aucune mesure de taux de collage d'atomes sur des agrégats.** C'est l'équilibre supposé entre dissociation et collage (évidemment statistiquement vrai à l'échelle macroscopique) qui fait apparaître comme paramètre la section efficace de collage σ , que l'on choisit toujours de façon extrêmement simple (voire simpliste). En général, σ est évalué dans un modèle de sphère dure, égal à une constante (la dimension de la cellule élémentaire dans le solide par exemple), multipliée par $N^{2/3}$, N étant le nombre d'atomes constituant l'agrégat. On ne tient donc pas compte de l'influence de structure électronique et de géométrie, qui module à l'évidence σ de façon non monotone en fonction de la taille de l'agrégat. Nous verrons d'autre part que, au moins pour les petites tailles, la section efficace de collage ne varie pas globalement comme $N^{2/3}$, mais comme N^α , $\alpha=1/2$ dans notre cas. Cet écart par rapport à une section efficace géométrique n'est pas une spécificité de notre système : par exemple, dans le collage d'un atome neutre sur un agrégat neutre liés par une interaction de Van der Waals, $\alpha=1/3$ et non $2/3$.

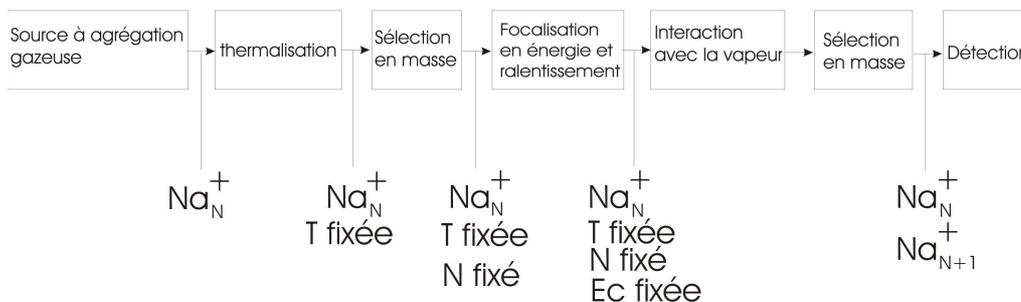
Nous avons choisi de mesurer dans un premier temps les sections efficaces de collage des atomes de sodium sur des agrégats de sodium, car ceux-ci font partie des agrégats les mieux connus, à la fois expérimentalement et théoriquement. En particulier, les expériences de calorimétrie de H.Haberland² ont été menées sur cet élément.

On peut se demander pourquoi des mesures de σ n'ont pas encore été effectuées, puisque c'est un paramètre essentiel. Cela tient à la difficulté de réaliser une telle expérience avec les dispositifs expérimentaux habituels: il est très facile de fragmenter un agrégat (il est même très difficile d'éviter qu'il ne se fragmente !), mais coller un atome sur un agrégat trié en masse suppose de maîtriser parfaitement l'énergie de collision, qui doit être très basse, sinon on obtient l'effet exactement inverse, à savoir une fragmentation de l'agrégat ! Il a donc fallu imaginer une technique permettant de réaliser des collisions (agrégat chargé sélectionné en masse, atome) à des énergies de collision de quelques dixièmes d'eV.

3.2.2.1. Dispositif experimental

Manip collage : schéma de principe
Collage d'un atome Na sur un agrégat Na_N^+

On peut faire varier:
N : 2...200
T : 77 K ...500 K
Ec : 0,5...10eV



On mesure:
le nombre de Na_{N+1}^+ Formés et leur taux d'évaporation

Figure 4 : principe de l'expérience

Le principe de l'expérience est présenté sur la **Figure 4**. Des agrégats de sodium sont produits dans une source à agrégation gazeuse et ionisés par décharge de cathode creuse. Ils sont ensuite thermalisés par collisions avec un gaz neutre dans une enceinte dont on peut contrôler la température entre 77K et 500K. Après une première sélection en masse par temps de vol, l'agrégat de masse choisie doit être très fortement ralenti avant d'interagir avec la vapeur atomique. En effet, si l'énergie de collision dépasse quelque peu l'énergie de cohésion de l'agrégat, de l'ordre de l'électron volt, on aboutit au résultat exactement opposé à celui escompté, à savoir la dissociation de l'agrégat. Nous profiterons du fait que, dans notre cas, l'énergie dans le centre de masse (CM) est très inférieure à l'énergie cinétique dans le repère du laboratoire. Dans le repère du CM, nous espérons atteindre des valeurs de quelques dixièmes d'électron volts dès que la taille de l'agrégat est supérieure à 20.

La partie focalisation-collision est entièrement originale. Nous avons développé un spectromètre de masse dans lequel les agrégats ne sont pas focalisés en temps, comme dans un spectromètre de masse traditionnel de type Wiley Mc-Laren, mais sont focalisés en énergie. Le principe est représenté sur le schéma simplifié de la **Figure 5**. La simulation de distribution d'énergie cinétique de la **Figure 5**, de type monte-carlo, a été réalisée pour Na_{10} . On obtient aisément, en principe, des distributions d'énergie de largeur inférieure à l'eV. Après avoir focalisé les agrégats en énergie, il faut les ralentir à l'énergie voulue. Le ralentisseur est constitué de 14 plaques successives qui font croître le potentiel électrostatique exponentiellement et compensent les défocalisations spatiales grâce à une géométrie particulière.

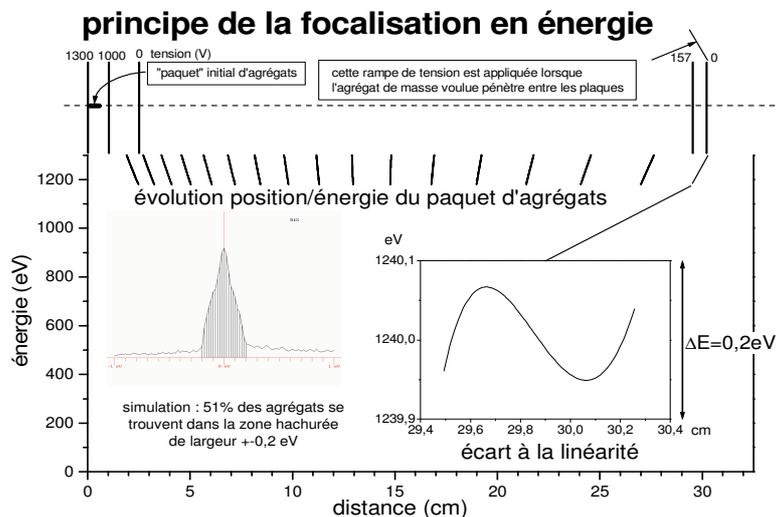


Figure 5 : principe du spectromètre de masse à focalisation en énergie

Les agrégats triés en masse et ralentis à l'énergie voulue traversent ensuite une cellule chauffée à environ 200°C contenant une vapeur atomique de sodium. C'est dans cette cellule que doit se produire la nucléation. L'énergie cinétique des atomes à cette température est de l'ordre de 0.1 eV. C'est l'énergie de collision minimale que l'on peut obtenir. Enfin, les

produits issus du collage sont triés en masse à la sortie de la cellule par un second spectromètre de masse de type Wiley-Mc-Laren avec un réflectron.

Nous pourrions mesurer l'énergie interne aussi bien des agrégats incidents Na_n que des agrégats produits Na_{n+1} par mesure de taux de dissociation induite par laser. Ce type de mesure a été déjà largement éprouvé en physique des agrégats³. Nous avons imaginé une technique nouvelle, possible uniquement dans notre expérience, pour détecter une éventuelle transition de phase solide-liquide à partir du rapport des taux de dissociation de l'agrégat initial Na_n et de l'agrégat produit Na_{n+1} . Cette mesure est basée sur l'existence d'une singularité de la capacité calorifique des agrégats au voisinage de la transition de phase (qui se traduit dans le solide massif par l'existence de la chaleur latente de fusion). Cependant, cette singularité est mal connue dans les agrégats et notre méthode de caractérisation demande à être validée.

3.2.2.2. Premiers résultats attendus

Pour chaque taille incidente n , nous mesurerons le taux d'agrégats de taille supérieure $n+1$ (voire $n+2$ ou $n+3$) produits au sein de la cellule de collage, ceci en fonction de la température initiale et de l'énergie de collision, toutes deux ajustable.

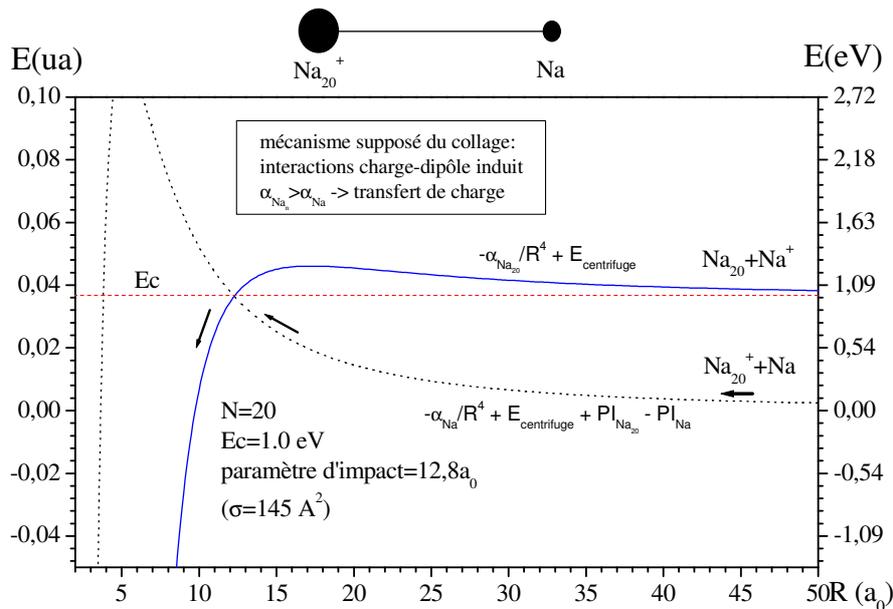


Figure 6 : modèle simplifié d'interaction agrégat-atome

Afin d'estimer les sections efficaces de collage attendues, nous avons calculé l'interaction agrégat chargé-atome dans un modèle simple, de type « harponnage », schématisé sur la **Figure 6** dans le cas de la collision $\text{Na}_{20}^+ + \text{Na}$. Dans ce modèle, la section efficace de collage est déterminée par un transfert d'électron depuis l'atome vers l'agrégat chargé positivement induit par la grande différence de polarisabilité entre les deux partenaires. La section efficace est dans ce cadre déterminée par le plus grand paramètre d'impact pour lequel la barrière centrifuge est inférieure à l'énergie de collision. Elle varie globalement approximativement comme $N^{1/2}$. Le cas limite est représenté sur la figure, dans lequel la

³ M. Schmidt, R.Kusche, W.Kronmüller, B.von Issendorf, H.Haberland, Phys. Rev. Lett. 79, 99 (1997)

hauteur de la barrière centrifuge (à peu près au croisement des deux courbes) est égale à l'énergie cinétique disponible E_c . Pour les grandes tailles ($n > 70$), c'est la section efficace géométrique (variant comme $N^{2/3}$), plus grande que la section efficace de harponnage, qui devient pertinente.

La **Figure 7** présente les sections efficaces calculées pour les collisions $Na_n^+ + Na \rightarrow Na_{n+1}^+$ à partir du modèle présenté ci-dessus. Les oscillations proviennent essentiellement des oscillations paire/impaire du potentiel d'ionisation de l'agrégat, bien connues dans les agrégats métalliques.

estimation des sections efficaces de collage $Na_n^+ + Na \rightarrow Na_{n+1}^+$ dans le modèle de transfert de charge

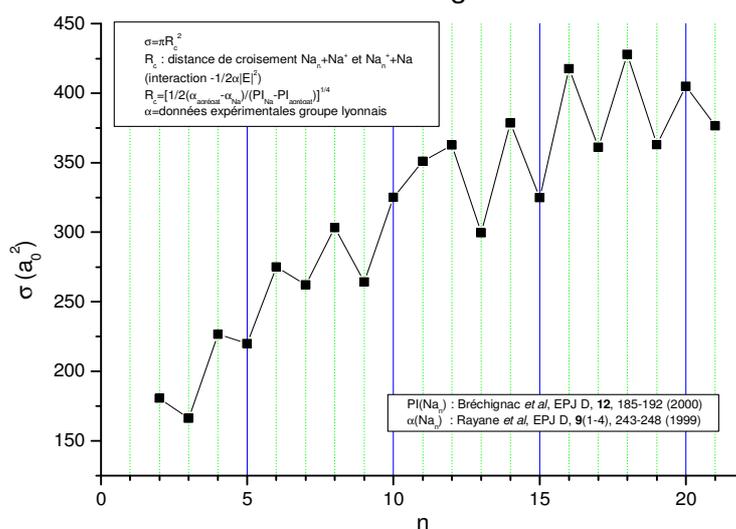


Figure 7: section efficaces de collage attendues pour les agrégats de sodium. Les polarisabilités des agrégats Na_n^+ sont celles déterminées expérimentalement par l'équipe de Ph. Dugourd (LASIM, Lyon).

3.2.2.3. Lien avec les théories classiques macroscopiques de la nucléation

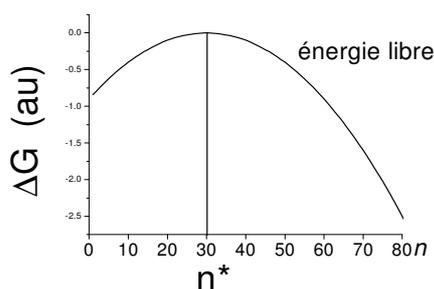


Figure 8 *Energie libre de Gibbs en fonction de la taille n de l'agrégat*

Nous n'entrerons pas ici dans les détails mais donnerons les idées essentielles de ces théories. Elles sont de nature thermodynamique, basées sur les propriétés de l'énergie libre de formation d'une gouttelette, c'est-à-dire l'énergie qu'il faut fournir pour passer de la taille n à la taille $n+1$. On utilise en général l'énergie libre de Gibbs $G(n, \Delta\mu)$. $\Delta\mu$ est la différence de potentiel chimique entre les deux phases, liquide et gaz par exemple. L'hypothèse fondamentale est qu'il existe une taille critique n^* pour laquelle le taux d'évaporation égale le taux de croissance. Cette taille n'est cependant pas une taille d'équilibre puisque

la fonction $\Delta G(n, \Delta\mu)$ présente un maximum et non un minimum en n^* (voir **Figure 8**).

L'expression fondamentale de ces théories^{4,5}, dénommée « théorème de nucléation », relie la taille critique n^* au travail de nucléation W^* :

⁴ D.W.Oxtoby and D.Kashchiev, J.Chem.Phys. 100, 7665 (1994)

⁵ D.Kashchiev, J.Chem.Phys. 76, 5098 (1982)

$$\frac{dW^*}{d\Delta\mu} = -n^* + \frac{\partial F^*}{\partial \Delta\mu} \quad \text{où } W^* = \Delta G(n^*, \Delta\mu) \quad (1)$$

F est une contribution à l'énergie libre spécifique aux nanoparticules, généralement associée à l'énergie de surface dans l'approximation dite *capillaire*.

La théorie du complexe activé, quant à elle, permet de relier le taux de réaction J à l'énergie libre :

$$J = A \exp(-W^*/kT) \quad (2)$$

A est un préfacteur cinétique extrêmement délicat à évaluer théoriquement.

Les équations (1) et (2) permettent de déduire indirectement la taille critique n^* des mesures

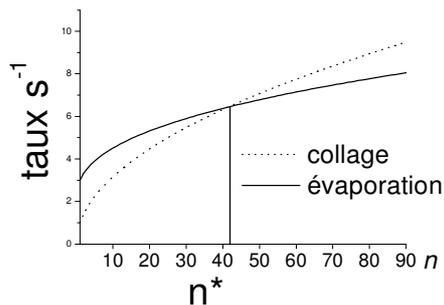


Figure 9 Courbe d'évaporation et de collage réalisables dans notre expérience.

expérimentales de J dans les expériences « traditionnelles » de nucléation. Dans notre expérience, par contre, nous pourrions mesurer **directement**, pour la première fois, la valeur de la taille critique de nucléation n^* . Bien que la validité des théories de nucléation puisse être mise en doute pour les petites valeurs de n^* mesurées jusqu'ici⁶, les arguments théoriques laissent supposer qu'une telle taille critique existe bien. Lorsque cette taille critique est atteinte, le taux d'évaporation compense exactement le taux de collage. Or, nous serons en mesure de déterminer à la fois les sections efficaces

de collage et la probabilité d'évaporation en fonction de la taille (**Figure 9**). Il sera possible de déduire directement de ces mesures les conditions qui, dans une vapeur, réaliseront l'égalité des taux de collage et d'évaporation. Il suffit pour cela de supposer une relation entre densité, température et énergie cinétique dans la vapeur.

3.2.2.4. Etat d'avancement de l'expérience de nucléation

La mise au point de la partie « originale » de l'expérience, c'est-à-dire le dispositif de focalisation en énergie et de ralentissement d'agrégats triés en masse, a débuté vers septembre 2004. Nous avons tout d'abord testé la partie focalisation, en utilisant le réflectron pour créer une barrière de potentiel variable sur le trajet des agrégats. L'enregistrement du signal d'ions, détecté en aval du réflectron, en fonction de la tension de barrière appliquée, nous donne accès à la distribution de vitesse par dérivation de ce signal. Les variables à ajuster sont les valeurs de hautes tensions générées en impulsions et les retards entre ces impulsions. Bien que le calcul nous donne les valeurs théoriques à appliquer, les imperfections du dispositif et les incertitudes sur certains paramètres tels la vitesse initiale des agrégats issus de la source rendent très difficile l'ajustement de ces paramètres. Les tensions, de l'ordre du kV, doivent être ajustées avec une précision supérieure au volt, et les retards à quelques nanosecondes près. De plus, nous travaillons dans un espace de paramètres multidimensionnel interdépendants, ce qui rend délicat l'optimisation. Nous avons réussi à obtenir de façon reproductible des distributions d'énergies de largeur inférieure à 3-5 eV, limite de précision de la méthode. Grâce à ce premier travail, il a été possible de poursuivre l'optimisation plus finement en utilisant une technique plus directe : en appliquant cette fois-ci une tension de ralentissement, on mesure le signal en fonction du temps d'établissement de l'impulsion d'accélération du second temps de vol (*TOF* sur la Figure 10). Puisqu'on connaît le moment où l'agrégat quitte la zone de ralentissement, on en déduit sa vitesse puisqu'on connaît alors le

⁶ J. Wölk, R. Strey, J. Phys. Chem. B **105**, 11683 (2001)

temps mis pour parcourir une distance connue (c'est la distance d représentée sur la **Figure 10**).

Le dispositif expérimental est aujourd'hui quasiment opérationnel. La faisabilité des expériences de collages est démontrée : nous sommes d'ores et déjà capables de produire des agrégats de masse voisine de 100 sélectionnés en masse, thermalisés, à une énergie cinétique inférieure à 8 ± 0.5 eV dans le repère du laboratoire, soit de l'ordre de 0.15 eV dans le repère du centre de masse. Cette valeur est déjà suffisamment basse pour réaliser des expériences de collages. Nous évaluons directement l'énergie cinétique des agrégats en mesurant leur temps de parcours depuis la sortie de la zone de ralentissement jusqu'au second temps de vol. La **Figure 10** présente une distribution d'énergie cinétique obtenue pour Na_{82} .

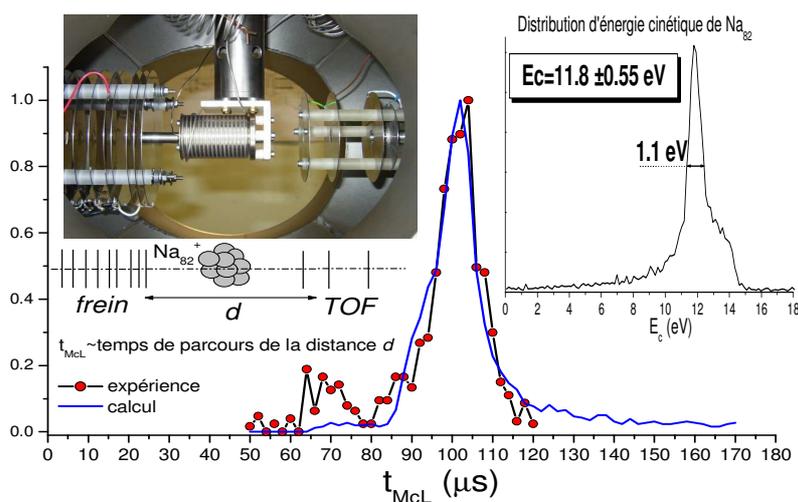


Figure 10 : Mesure pour Na_{82} du signal en fonction du délai t_{McL} entre le temps d'établissement de l'impulsion HT du second temps de vol et la sortie du ralentisseur. En haut à droite est présentée la distribution d'énergie cinétique correspondante.

3.2.3. Projet : collage sur des agrégats d'eau

3.2.3.1. Insertion du projet dans le contexte scientifique

Les nuages résultent de la condensation de vapeur d'eau dans l'atmosphère, ou en d'autres termes de l'agrégation successive de molécules d'eau initialement sous forme gazeuse. La description de ce phénomène en apparence simple est en fait d'une grande complexité. A vrai dire, les physiciens sont encore aujourd'hui incapables de le décrire correctement. Cette question jouit depuis une décennie d'un intérêt accru à cause de son implication dans l'évolution du climat global. Les nuages stratosphériques, aussi dénommés *cirrus*, jouent un rôle essentiel dans l'équilibre thermique de la terre. Il y a deux raisons à cela : d'une part, ils sont largement transparents au rayonnement solaire incident et réfléchissent l'infrarouge réémis par la terre, contribuant ainsi à réchauffer l'atmosphère. D'autre part, on suppose qu'ils sont responsables de la destruction de la couche d'ozone en catalysant la formation de chlore atomique, responsables de la transformation de l'ozone en dioxygène, à partir des molécules ClONO_2 qui, en l'absence de cette catalyse, constituent le produit final inerte du cycle de destruction de l'ozone. Comprendre les mécanismes de nucléation de l'eau est donc un enjeu d'actualité important.

Pourquoi connaît-t-on si mal les processus de nucléation de l'eau ? L'eau est un corps aux propriétés physico-chimiques particulièrement déroutantes et difficiles à décrire

théoriquement. Au niveau moléculaire, la difficulté de modélisation provient de la nature des liaisons en jeu, notamment la liaison hydrogène, qui se prêtent mal aux approximations nécessaires lorsqu'on traite plusieurs particules en interaction. Deuxièmement, le processus de nucléation parcourt différentes échelles de la physique, depuis la molécule unique jusqu'à la gouttelette macroscopique. Ces deux échelles ne peuvent pas être décrites dans une approche théorique commune. Les molécules d'eau sont décrites par la mécanique quantique, tandis que les propriétés des gouttelettes, la capillarité ou sa vitesse limite de chute dans l'atmosphère, par exemple, se calculent dans le cadre de théories purement macroscopiques. Entre ces deux extrêmes, la « nanogouttelette » de quelques dizaines, centaines ou milliers de molécules relève de la physique des agrégats, domaine dans lequel notre groupe est spécialisé depuis plusieurs années.

3.2.3.2. Justification et Description du projet

L'approche expérimentale traditionnelle de la nucléation consiste à mesurer le taux de nucléation de gouttelettes, c'est-à-dire la densité de gouttelettes formées à partir de conditions gazeuses dans des enceintes où l'on maîtrise les conditions de densité, de température et de pression. Les mesures consistent à détecter la diffusion de Mie d'un faisceau laser, qui est reliée à la taille des particules. Elles permettent de caractériser la taille moyenne des particules, mais est limitée à des tailles déjà macroscopiques dans l'acception définie plus haut. On peut également, en mesurant le taux de dépolarisation du laser, évaluer la proportion de particules solides et liquides.

Dans notre projet, nous mesurerons les taux de nucléation de particules d'eau constituées d'une dizaine à quelques centaines de molécules. Une bonne description de ce domaine de tailles est essentielle pour comprendre le phénomène général de nucléation. En effet, les modèles thermodynamiques actuellement en vigueur supposent l'existence d'une taille critique à partir de laquelle la croissance devient exponentielle et conduit inéluctablement et très rapidement à la formation d'une gouttelette macroscopique. Dans les conditions atmosphériques, cette taille critique n'est que de quelques dizaines ou centaines de molécules. Malheureusement, ces modèles (voir paragraphe 2.4.) sont basés sur des concepts purement macroscopiques, tels que la capillarité (d'où leur nom générique de modèles capillaires), et sont inadaptés à la description de particules de si petite taille.

Un numéro spécial de la revue *Journal of Physical Chemistry B*⁷ a récemment été consacré à la nucléation dans les aspects ci-dessus évoqués.

Nos outils expérimentaux seront les mêmes que ceux utilisés dans les expériences sur le sodium. Concrètement, nous pourrions ainsi déterminer des taux de nucléation homogène et hétérogène, qui ne sont connus qu'à plusieurs ordres de grandeur près⁷ pour l'eau dans les conditions atmosphériques.

3.2.3.3. Description du projet et résultats attendus

3.2.3.3.1. Nuages et agrégats d'eau

Les nuages résultent de la nucléation de l'eau dans des conditions de sursaturation, c'est-à-dire quand la pression partielle d'eau est supérieure à sa pression de vapeur saturante. Leur formation ne résulte probablement pas d'une nucléation homogène. Pawlowski et ses collaborateurs⁸ estiment que dans l'air à 20°C sursaturé à 200% il faudrait 10^{46} ans pour former une goutte par cm^3 par nucléation homogène! C'est la présence de germes de nucléation qui rend possible la condensation de l'eau en gouttes dans les nuages. L'acide sulfurique H_2SO_4 est suspecté d'être un des principaux agents de nucléation dans

⁷ J. Phys. Chem. B 105, Special Issue *Howard Reiss Festschrift* (2001)

⁸ P. M. Pawlowski, S. R. Okimoto, F.M. Tao, J. Phys. Chem. A 107, 5327 (2003)

l'atmosphère. L'énergie de liaison de l'eau avec les composés $H_2SO_4(H_2O)_n$ est forte, d'où des constantes élevées (comparées à la nucléation homogène) de réactions de type : $H_2SO_4(H_2O)_n + H_2O \rightarrow H_2SO_4(H_2O)_{n+1}$. Ceci est connu à l'échelle macroscopique, a été calculé par les méthodes de la chimie quantique pour les tout petits systèmes ($n=1..6$)⁸, mais n'a jamais été ni calculé ni mesuré à l'échelle des agrégats. Une connaissance quantitative de ces taux de réaction est importante dans la mesure où une très petite variation de section efficace induit des différences phénoménales dans les taux de formation de gouttelettes.

La formation des cirrus

Les cirrus polaires de haute altitude, appelés PSC (Polar Stratospheric Clouds), sont généralement formés de particules solides. Couvrant jusqu'à 30% de la surface de la terre, ils sont quasiment transparents dans le visible et très absorbants dans l'infrarouge, et contribuent ainsi à l'effet de serre⁹. Les cirrus sont composés de microgouttelettes, homogènes ou hétérogènes (parfois liquides, en surfusion) essentiellement de trois types^{9,10} classés selon une nomenclature standard:

Type **Ia** : $(H_2O)_n(HNO_3)_p$ (1 μm de diamètre, liquide en surfusion)

Type **Ib** : $(H_2O)_n(HNO_3)_p(H_2SO_4)_q$ (1 μm de diamètre, cristallin)

Type **II** : $(H_2O)_n$ (10-100 μm de diamètre, cristallins)

Notons que dans les cirrus stratosphériques (de 15 km à 50 km d'altitude), la nucléation homogène de glace, qui forme des cristaux de type **II**, est beaucoup plus probable que dans la troposphère (couche basse de l'atmosphère). En effet, dans les conditions de pression et de température qui y règnent, le point de gelée blanche est facilement atteint: à 20km d'altitude, zone privilégiée de formation des nuages stratosphériques polaires, la température est de 185 K, la pression de 60 mbar et le point de gelée est à 188 K pour une pression partielle en eau de 5 ppmv.

La présence de particules **Ia**, **Ib** et **II** n'est qu'une hypothèse. On ne connaît ni les stœchiométries privilégiées ni les mécanismes de formation. Le degré d'hydratation (valeur de n/p dans une particule $(H_2O)_nM_p$, calculé en moyenne dans les liquides, dans une maille élémentaire dans les cristaux) des particules de type **I** les plus probablement formées ou les plus stables est encore sujet à controverse^{10,11}. Imre et ses collaborateurs¹¹ ont montré que les particules constituées de sous-unités $(H_2O)_n/H_2SO_4$ semblent, dans les conditions stratosphériques, plus stables pour $n=8$ que pour $n=4$, comme cela était supposé. De même, la question de la prééminence, dans les cristaux de type **Ia**, de dihydrate $(H_2O)_2/HNO_3$ (NAD) ou de trihydrate $(H_2O)_3/HNO_3$ (NAT) reste posée. La communauté des physico-chimistes de l'atmosphère est intéressée par toute avancée concernant non seulement les mécanismes élémentaires de nucléation de ces particules, mais aussi leur stabilité aux tailles microscopiques. Par ailleurs, dans les années 1970 certains auteurs ont suggéré que les particules émises par les réacteurs d'avions pouvaient avoir un effet non négligeable sur la formation des cirrus^{12,13,14}. On sait déjà que les traînées de condensation laissées derrière eux par les avions sont de même nature que les cirrus, mais on n'en connaît pas les mécanismes de formation. En effet cette condensation de l'eau ne devrait pas se produire, du moins avec cette importance, sur de tels germes puisque les particules émises, probablement du type HAP (Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques), sont *a priori* très hydrophobes. L'équipe de O. Popovitcheva (Institute of Nuclear Physics, Moscow State University, 119 992, Moscow,

⁹ M.A. Zondlo, P. K. Hudson, A.J. Prenni, M.A. Tolbert, Ann. Rev. Phys. Chem. 51, 473 (2000)

¹⁰ T.J. Fortin, K. Drdla, L.T. Iraci, M.A. Tolbert, Atmos. Chem. Phys. 3, 987 (2003)

¹¹ D.G. Imre, J. Xu, A.C. Tridico, Geophysical Research Letters 24 (1), 69 (1997)

¹² P.J. Crutzen, J. R. Meteorol. Soc. 96, 320 (1970)

¹³ H.S. Johnston, Science 173, 517 (1971)

¹⁴ "Ice, Soot and Aviation : what Impact on Environment ?", La Londe Les Maures, France, may 10-14 (2004)

Russia) tente de caractériser la nature exacte des particules émises par les réacteurs; pour notre part, nous mesurerons les sections efficaces de nucléation de molécules d'eau sur des nanoparticules carbonées dont la nature exacte reste à déterminer en fonction des résultats obtenus par O. Popovitcheva.

3.2.3.3.2. La nucléation de l'eau : aspects fondamentaux

Limites de l'approche classique de la nucléation

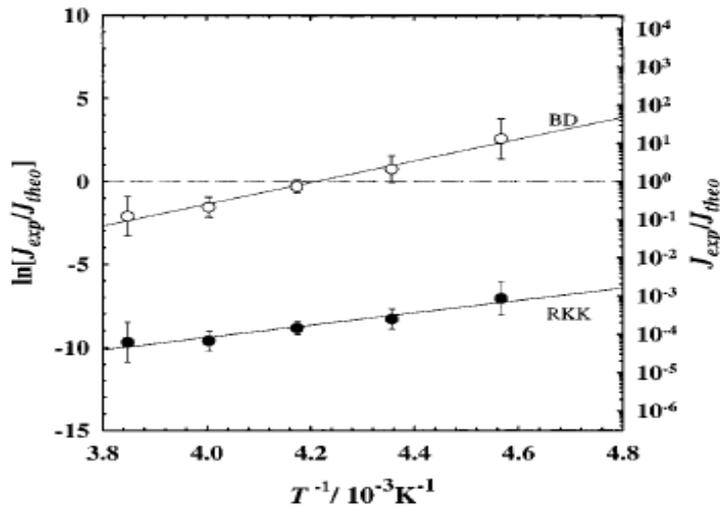


Figure 11 : Nucléation de l'eau : comparaison expérience/théorie. J_{exp} : taux de nucléation expérimentaux. BD et RKK : deux variantes de la théorie classique de nucléation. Attention, l'ordonnée représente le log de l'écart relatif expérience-théorie! (Figure extraite de la référence ⁶).

de température explorée (entre 220 et 260 K) cependant, les deux taux de nucléation sont semblables en fonction du paramètre de supersaturation, ce qui semble bien conférer à ce paramètre une certaine pertinence. Les théories classiques de nucléation sont clairement mises en échec (voir **Figure 11**). Merikanto et ses collaborateurs¹⁵ ont simulé par une méthode Monte Carlo ces expériences. Ils estiment reproduire de façon satisfaisante ces résultats expérimentaux (« ...agree well with the experimental data ...») bien que les taux de nucléation calculés soient surestimés par un facteur 2×10^4 et que les simulations soient incapables de reproduire la différence isotopique d'un facteur 2500 mentionnée plus haut! Ceci mesure bien le chemin qu'il reste à parcourir.

Quelques expériences intéressantes ont également déjà été consacrées aux transitions de phase dans les nanoparticules d'eau. En particulier, Huang s'est intéressé à la nucléation, ici comprise comme transition liquide-solide, de nanoparticules d'eau d'environ 5000 molécules produites en jet moléculaire supersonique¹⁶. La structure des agrégats est sondée par diffraction électronique, directement à la sortie de la tuyère du jet supersonique. Cette technique, astucieuse, ne détermine pas directement la température, mais donne une mesure moyennée sur une large distribution de masses, et concerne des particules évoluant dans les conditions très particulières d'une expansion supersonique. Le résultat le plus clair est que l'eau, initialement surfondue dans ces conditions, cristallise sous forme de réseau cubique Ic, et non sous la forme hexagonale Ih. Selon les auteurs, cela explique les différences d'une dizaine d'ordres de grandeur, voire plus, avec les prédictions des théories classiques de

Le stade initial de la formation de nanoparticules d'eau est mal connu, bien qu'au niveau macroscopique, de nombreuses études aient mesuré les taux de nucléation de gouttelettes d'eau, c'est-à-dire le nombre de gouttelettes formées dans une enceinte par unité de temps et de volume dans des conditions de température et de pression partielle d'eau maîtrisées⁶. Des effets isotopiques ont même été observés par J. Wölk et ses collaborateurs⁶ : dans leurs conditions expérimentales, le taux de nucléation de D₂O est 2500 fois plus grand que celui de H₂O pour une même température et une même pression. Dans la gamme

¹⁵ J. Merikanto, H. Vehkamäti, E. Zapadinsky, J. Chem. Phys. 121(2), 914 (2004)

¹⁶ J. Huang, L. Bartell, J. Phys. Chem. 99, 3924 (1995)

nucléation. Des ajustement *ad hoc*, notamment de la tension superficielle σ_{SL} , sont introduites dans les modèles afin de tenter de réconcilier théorie et expérience. La relation empirique proposée par Turnbull¹⁷ en 1964 $\sigma_{SL}(T) = \sigma_{SL}(T_1)(T/T_1)^n$ est toujours utilisée. La valeur de n est ajustée afin de reproduire au mieux l'expérience. Cependant, même le signe de n est encore sujet à controverse!

La littérature sur le sujet est trop volumineuse pour que nous en fassions le tour ici. Nous avons cité les deux exemples ci-dessus essentiellement afin de montrer que l'approche usuelle des problèmes de nucléation est assez empirique et encore très peu prédictive et explicative. L'approche « moléculaire », telle que nous l'envisageons, devrait apporter une connaissance plus solide et quantitative de ces phénomènes.

3.2.3.3. Notre contribution

Par des expériences analogues à celles menées sur le sodium, nous mesurerons les sections efficaces de collage de molécules d'eau sur des agrégats d'eau de taille et de température variables et connues. Comme dans la cas du sodium, afin de sélectionner en masse, de focaliser en énergie et de ralentir les agrégats, nous devons nécessairement travailler sur des espèces chargées $(H_2O)_nH_3O^+$. La source devra évidemment être différente. Le type de source à utiliser n'est pas encore définitivement choisi. Plusieurs options sont possibles : une source à agrégation gazeuse et ionisation par décharge de cathode creuse modifiée, une source de type électrospray, un tube à décharge Corona,... Nous travaillons actuellement à définir la solution optimale.

Les agrégats d'eau seront ensuite thermalisés de la même façon que le sodium, puis focalisés en énergie et ralentis. L'énergie de liaison par molécule d'un agrégat d'eau, de l'ordre de 0.5 eV, est compatible avec les expériences de collage : nos estimations montrent que, d'une part, les agrégats thermalisés entre 150 K (limite basse de température accessible) et la température ambiante ont une durée de vie suffisante pour atteindre la cellule de collage ; d'autre part, leur durée de vie après collage d'une molécule dans la cellule est également suffisante pour atteindre le détecteur sans se dissocier.

Plusieurs expériences sont envisagées :

i) Nucléation homogène

Nous mesurerons les sections efficaces des réactions $(H_2O)_n + H_2O \rightarrow (H_2O)_{n+1}$ et les taux de dissociation des produits formés. Il devrait être possible de photodissocier les agrégats d'eau en les excitant dans la bande de la vibration O-H, autour de $3\mu m$. Bien que des calculs plus précis restent à faire, l'énergie par photon correspondante, d'environ 0.4 eV, devrait provoquer des évaporations mesurables dans les fenêtres de temps accessibles. Le rayonnement à $3\mu m$ pourrait être engendré par la source d'impulsions femtoseconde disponible dans une autre équipe de notre laboratoire avec qui nous avons déjà collaboré. Nous étudierons la possibilité de déduire de ces taux de dissociation la phase (solide ou liquide) des réactants et des produits. Ce dernier aspect est particulièrement intéressant dans le cadre de l'orientation « physique des nuages ». Nous avons déjà parlé du cas des cirrus. L'aspect « surfusion » intéresse également les nuages de la troposphère : en effet, des gouttelettes d'eau sont présentes sous les deux formes liquides (en surfusion) et solide dans les nuages dits mixtes, entre 2 km et 8 km d'altitude), à des températures comprises entre 0°C et -40°C, limite connue de la surfusion. Dans ces nuages, les gouttes solides ne deviennent majoritaires qu'en dessous de -8°C.

¹⁷ D. Turnbull, in *Physics of non-crystalline solids*, ed. J.A. Prins, North-Holland, Amsterdam (1964)

ii) Nucléation hétérogène

Le but est de mesurer les sections efficaces des réactions $(\text{H}_2\text{O})_n + \text{Y} \rightarrow (\text{H}_2\text{O})_n\text{Y}$ et la phase des produits. Outre l'influence de Y sur les taux de nucléation, dont nous avons déjà parlé, nous pourrions examiner l'influence de Y sur la phase de l'agrégat formé. Le réactant Y sera, dans un premier temps, de l'acide sulfurique, nitrique, ou un mélange des deux, afin de reproduire les particules de type **Ia** et **Ib** présentes dans les cirrus. Le réactant Y pourra aussi être une particule carbonée (PAH, Fullerènes) afin de reproduire les suies émises par les avions. Il serait également intéressant de sonder une propriété liée à la géométrie : il est généralement admis que le gel d'une particule en surfusion peut être provoqué par un effet stéréochimique : les germes de symétrie hexagonale et de dimension de maille voisine de celle de l'eau (environ 0.45 nm) provoquent le gel dès 0°C.

iii) Collisions avec un gaz rare

Il sera intéressant d'étudier l'effet de collisions non collantes avec un gaz rare sur la phase des agrégats, par exemple $(\text{H}_2\text{O})_n + \text{Ar} \rightarrow (\text{H}_2\text{O})_n^* + \text{Ar}$. On sait qu'un apport d'énergie mécanique peut « quencher » la surfusion. De nombreuses expériences de « sonocrystallisation » ont été récemment menées^{18,19}. Elles consistent à soumettre un échantillon d'eau surfondue à une vibration ultrasonique. On observe alors, sous certaines conditions, une cristallisation induite. Au niveau microscopique, un apport d'énergie mécanique sous forme de collision avec un atome de gaz rare est-il capable de provoquer une telle cristallisation sur un agrégat surfondu ? Telle est la question à laquelle nous aimerions répondre.

Modélisation et simulations numériques

Nous compléterons notre travail expérimental par une étude théorique par modélisation et simulations, en collaboration avec F. Calvo et F. Spiegelman (LPQ, IRSAMC). Cette étude devra permettre d'estimer avec une plus grande précision certaines propriétés calorimétriques (point de fusion, taux d'évaporation,...) et dynamiques (sections efficaces de collage) pour des agrégats purs ou hétérogènes. La description des interactions entre molécules nécessitera un effort de modélisation en particulier en présence d'impuretés. Alors que divers potentiels moléculaires sont disponibles pour l'eau pure neutre²⁰ et protonée²¹ ainsi que pour un mélange eau-acide sulfurique²² globalement neutre, il nous faudra extraire des potentiels pour ce mélange protoné à partir de calculs de chimie quantique. Les phases et le point de fusion seront évalués par simulations Monte Carlo et les sections de collage par dynamique moléculaire.

Ce projet a fait l'objet d'une demande de financement dans le cadre de l'ANR qui vient d'être retenue.

¹⁸ T. Hozumi, A. Saito, S. Okawa, T. Matsui, Int. J. of Refrigeration 25 (7), 948 (2002)

¹⁹ X. Zhang, T. Inada, A. Yabe, L. Shushen, Y. Kosawa, Int. J. of Heat and Mass Transfer 44 (23), 4533 (2001)

²⁰ ex : TIP4P, W.L. Jorgensen, J. Chandrasekar, J.D. Madura, J. Chem. Phys. 79, 926 (1983)

²¹ ex : R. Vuilleumier and D. Borgis, Chem. Phys. Lett. 284, 71 (1998)

²² S.M. Kathmann and B.N. Hale, J. Phys. Chem. B 105, 11719 (2001)

3.2.4. Topographie des surfaces de potentiel d'agrégats et transitions de phase

Ce travail est l'œuvre de P. Labastie

Toute la thermodynamique d'un agrégat est contenue dans sa densité d'état configurationnelle, qui elle-même ne dépend que de la surface de potentiel. Or il est extrêmement difficile de visualiser la topographie de cette surface à grand nombre de dimensions, en particulier de déterminer les caractéristiques qualitatives nécessaires à l'apparition d'une transition de phase, quand on utilise les coordonnées cartésiennes qui décrivent les translations et les rotations du système en même temps qu'elles permettent l'exploration de la surface de potentiel. En fait, en physique, le choix des « bonnes » coordonnées est souvent crucial pour résoudre un problème.

L'idée de base de ce travail, c'est d'utiliser comme coordonnées les distances interatomiques. Beaucoup de potentiels sont basés sur une somme de potentiels de paires, ou sur la diagonalisation d'un hamiltonien dépendant des distances. De plus les distances interatomiques sont invariantes par rotation du système.

Malheureusement, un écueil de taille semble invalider cette idée : ces distances interatomiques ne sont pas indépendantes dès que le nombre d'atomes est supérieur à 4 (dans un espace à trois dimensions). Toutefois, les contraintes sur ces distances sont connues. Elles sont de deux types. Des égalités, définissant une variété dans l'espace des distances, et des inégalités, limitant la partie accessible de cette variété.

En fait, en plus du calcul de la densité d'état configurationnelle, l'étude d'une surface de potentiel requiert souvent la connaissance :

2. des minima locaux et du minimum absolu ;
3. de la dynamique sur cette surface.

Pour la recherche des minima locaux d'ensembles de N particules, on peut utiliser une méthode de Lagrange avec $N(N-1)/2$ variables de distances et $(N-4)(N-3)/2$ contraintes. Le coût numérique paraît lourd, par rapport aux $3N$ variables cartésiennes. Toutefois, la résolution de $(N-4)(N-5)/2$ des équations de Lagrange est triviale. La complexité est donc du même ordre de grandeur qu'en cartésienne.

Pour la recherche de minima globaux, nous proposons une méthode indépendante du potentiel utilisé. Parmi les $N(N-1)/2$ distances interatomiques, seules $3N-6$ sont indépendantes. C'est donc le nombre maximum de distances qui peuvent être choisies égales à la distance d'équilibre r_0 d'un potentiel de paire. On peut calculer les autres distances en utilisant les équations des contraintes. Si on a toutes les configurations avec $3N-6$ distances égales à r_0 , il y a de fortes chances que l'une d'entre elle soit très proche de la configuration correspondant au minimum global du potentiel. Mais l'obtention de ces configurations n'est qu'un problème de théorie des graphes, pour lequel de puissants algorithmes existent. Nous travaillons actuellement à accélérer la résolution des équations de contraintes en utilisant des méthodes issues des mathématiques appliquées pour la résolution d'équations polynomiales.

D'autre part, nous avons obtenu quelques résultats (en cours de rédaction) pour une étude qualitative de la densité d'état configurationnelle de très petits agrégats, montrant que la frustration impliquée par la limitation de l'espace accessible pourrait expliquer la transition solide-liquide dans les petits systèmes. Ces développements extrêmement prometteurs seront poursuivis au cours du prochain contrat.

3.2.5. Conclusion

Jusqu'à la fin de l'année 2002 ont été menées, en collaboration avec l'équipe *Spectroscopie moléculaire ultrarapide et contrôle cohérent* des expériences de spectroscopie ultrarapide sur l'agrégat Na_3F , complétées par des expériences de spectroscopie par photodépopulation. Fin 2002 a débuté le montage d'une nouvelle expérience visant à étudier au niveau moléculaire le phénomène de nucléation des agrégats. Le dispositif expérimental, dont le principe est original, est actuellement en phase finale de tests sur un système modèle, le sodium. La progression de la mise au point s'est accélérée depuis septembre 2004 grâce à la présence d'un nouveau doctorant, Fabien Chirot, et d'un nouveau membre permanent dans notre équipe, Sébastien Zamith. Ce dispositif est aujourd'hui presque opérationnel et a déjà démontré la faisabilité des expériences envisagées : nous sommes capables de produire des agrégats dans des conditions qui permettent théoriquement le collage d'un atome. Les premiers essais de collage devraient avoir lieu avant la fin de l'année 2005.

3.3. Collaborations nationales et internationales

Dates	Programme/ financement	Correspondant	Université/ Institut –ville	Pays	Thème	Publications
2003	LCAR	V. Blanchet	UPS Toulouse	France	Spectroscopie femtoseconde de Na_3F : expériences	3
2003	LCAR	M.C. Heitz	UPS Toulouse	France	Spectroscopie femtoseconde de Na_3F : théorie	3
2002	GDR agrégats	P. Dugourd	LASIM Lyon	France	Mesures de dipôles d'agrégats Na_nF_p	7

3.4. Soutiens financiers obtenus au cours des 4 années

Dates	Programme	Titre du projet	Montant k€
2003	Action spécifique CNRS	Spectromètre à agrégats	20
2003-2004	PROCOPE	Dynamique d'agrégats d'alcalins	8

3.5. Publications

3.5.1. Publications dans des revues à comité de lecture

2005

- 1) F. Calvo, P. Labastie, "Computer simulation of the shape and phase transitions, in finite systems", Eur. J. Phys., 26, S23-30 (2005)
- 2) S. Zamith, Z. Ansari, F. Lepine and M.J.J. Vrakking "Single-shot measurement of revival structures in femtosecond laser-induced alignment of molecules" Opt. Lett. 30, 2326-2328 (2005)
- 3) T. Schlatholter, R. Hoekstra, S. Zamith and M.J.J. Vrakking "Response of polyatomic molecules to ultrastrong laser- and ion-induced fields" Phys. Rev. Lett. 94, 233001/1-4 (2005)

2004

- 4) J.M. L'Hermite, V. Blanchet, A. Le Padellec, B. Lamory and P. Labastie, "Relaxation of photoexcited Na₃F." Eur. Phys. J. D 28, 361–366 (2004)

2003

- 5) T. Nzeyimana, E.A. Naji, X. Urbain and A. Le Padellec "Merged beam study of the associative ionisation (C⁺, N⁺ and O⁺) + O⁻" Eur. Phys. J. D, 19, 315-325, (2002)
- 6) Al-Khalili, S. Rosen, H. Danared, A. M. Derkatch, A. Källberg, M. Larsson, A. Le Padellec, A. Neau, J. Semaniak, R. Thomas, M. af Ugglas, L. Vikor, W. Zong, W.J. van der Zande, X. Urbain, M.J. Jensen, R.C. Bilodeau, O. Heber, H.B. Pedersen, C.P. Safvan, L. Andersen, M. Lange, J. Levin, G. Gwinner, L. Knoll, M. Scheffel, D. Schwalm, R. Wester, D. Zajfman and A. Wolf "Absolute High-Resolution Rate Coefficients for Dissociative Recombination of Electrons with HD⁺: Comparison of Results from Three Heavy Ion Storage Rings" Phys. Rev. A, 68, 042702/1-14, (2003)
- 7) K. Fritioff, D. Hanstorp, J. Sandström, A. Ehlerding, M. Larsson, G.F. Collins, D.J. Pegg, H. Danared, A Källberg and A. Le Padellec "*Electron-impact detachment of Cl⁻*" Phys. Rev. A, 68, 012712/1-8, (2003)

2002

- 8) D. Rayane, I. Compagnon, R. Antoine, M. Broyer, P. Dugourd, P. Labastie, J.M. L'Hermite, A. Le Padellec, G. Durand, F. Calvo, F. Spiegelman and A.R. Allouche "Electric dipole moments and polarizabilities of single excess electron sodium fluoride clusters: Experiment and theory." J. Chem. Phys., 116, 10730-10738 (2002)
- 9) E.A Naji, T. Nzeyimana, X. Urbain and A. Le Padellec "Merged beam study of the associative ionisation O⁻+D⁺/O⁺⁺D⁻ and C⁺⁺D⁻" J. Phys. B, 35, 4325-4334, (2002)
- 10) A.Le Padellec, G.F. Collins, H. Danared, A. Källberg, F. Hellberg, K. Andersson, D. Hanstorp and M. Larsson "Relative cross sections for the Electron Impact Single Detachment on Li-" J. Phys. B, 35, 3669-3676, (2002)

3.5.2. Section de livre

F. Calvo, P. Labastie, Chapitre III Thermodynamique et transition solide-liquide du livre *Nanosciences*, tome 2 : *Nanomatériaux*, à paraître début 2006 aux éditions Belin, eds. M. Lahmani et Ph. Houdy.

3.5.2. Actes de conférences à comité de lecture

- 1) V. Blanchet, J.-M. L'Hermite, A. Le Padellec, B. Lamory, P. Labastie "*Vibrational relaxation of photoexcited Na₃F*", in "Ultrafast Molecular Events in Chemistry and Biology", Martin, M. M., Hynes, J. T. Eds, Elsevier, p 57-61 (2004)
- 2) P. Labastie "*Phase Transitions in Free Clusters*", proceedings of the Condensed Matter Theory 27 conference, ed. M. Dinh and M. Belkacem, Nova Science (2005)

3.5.3. Conférences invitées

P. Labastie, Condensed Matter Theory (sep. 15-20 2003, Toulouse, France), "*Phase Transitions in Free Clusters*".

3.5.4. Conférences

- 1) J.-M. L'Hermite, V. Blanchet, A. Le Padellec, P. Labastie, Femtochemistry VI (juillet 2003, Paris) « *Vibrational relaxation of photoexcited Na₃F* » **poster et actes publiés**
- 2) J.-M. L'Hermite, V. Blanchet, A. Le Padellec, P. Labastie, Coloq 8 (septembre 2003, Toulouse), « *Vibrational relaxation of photoexcited Na₃F* » **poster et actes publiés**
- 3) J.-M. L'Hermite, A. Le Padellec, P. Labastie, "Ice, Soot and Aviation : what Impact on Environment ?" (may 10-14 2004, La Londe Les Maures, France), « *A Molecular approach of ice nucleation* », **poster**
- 4) P. Labastie, TAMC4 (april 24-28 2004, Toulouse, France) « *Geometrical constraints for the minimization of Pair Potentials* », **poster**

7. Spectrométrie d'électrons dans les collisions

7.1. Composition de l'équipe :

Responsables :

A. Bordenave-Montesquieu jusqu'au 1/1/2004
 P. Moretto-Capelle depuis le 1/1/2004

Permanents :

A. Bordenave-Montesquieu (DR2), jusqu'au 22/07/05
 D. Bordenave-Montesquieu (IR), jusqu'au 22/07/05
 A. LePadellec (MCF), depuis le 01/09/04
 P. Moretto-Capelle (CR1)

ATER :

M.	Arnaud	Rentenier		Sept 2003	Juillet 2004
----	--------	-----------	--	-----------	--------------

Doctorant :

M.	Arnaud	Rentenier	MEN	Sept 2000	Sept 2003
----	--------	-----------	-----	-----------	-----------

Visiteur :

Mme	Magda	Staicu-Casagrande	LCAM (Orsay)	Sept 2003	Sept 2003
-----	-------	-------------------	--------------	-----------	-----------

Stagiaires (maîtrise, magistère, DEA, Ecoles, autres) :

M	Sebastien	Bonhommeau	UPS	DEA	Avril 2003	Juin 2003
M	Nicolas	Jelineck	UPS	Maîtrise	Mai 2004	Juin 2004
Melle	Sophie	Massou	UPS	Maîtrise	Mai 2005	Juin 2005
M	Frederic	Franceries	UPS	Maîtrise	Mai 2005	Juin 2005
M	Guillaume	Briere	UPS	Licenc	Juin 2005	Juillet 2005

7.2. Compte-rendu de l'activité scientifique 01/01/2002 au 31/07/05

7.2.1. Introduction

La période 2002-2005 est essentiellement basée sur l'étude des collisions ions atomiques (H^+ , He^+ , He^{2+}) ou moléculaires (H_2^+ , H_3^+) faiblement chargés sur des molécules, dans un domaine d'énergie situé entre 1keV et 130keV. Quelques fins de travaux concernant la spectroscopie haute résolution dans les collisions ions-multichargés ont aussi été réalisés en début de période et ont conduit à publications. Les études sur le fullerène C_{60} ont porté sur la caractérisation des divers processus d'ionisation et de fragmentation (évaporation, fission asymétrique et multifragmentation) en terme d'énergie cinétique des fragments, rôle de l'énergie déposée dans les processus de multifragmentation, analyse en taille des fragments

mais aussi leur quantification en terme de sections efficaces absolues. Ces mesures réalisées pour différents systèmes collisionnels en fonction de l'énergie de collisions montrent des variations très différentes suivants les processus mais aussi en fonction des différents systèmes collisionnels. Une collaboration expérience-théorie s'est instaurée avec l'équipe hispano-française (F. Martin, M. Alcamí de Madrid, M.F. Politis de Paris et P.A. Hervieux de Strasbourg). Cette collaboration avait fait l'objet d'une demande PICASSO qui, hélas, n'a pas aboutie. Pour compléter l'analyse des particules chargées émises lors de la collision, nous sommes aussi intéressés à la spectrométrie des électrons éjectés. Grâce à des corrélations supplémentaires avec les fragments, nous avons mis en évidence que l'énergie de l'électron éjecté et le mode de fragmentation sont liés.

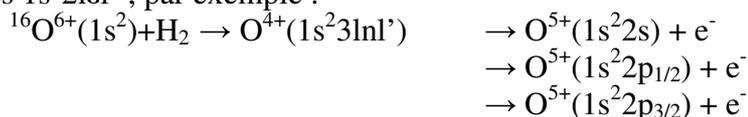
Nous avons débuté une nouvelle activité sur les molécules d'intérêts biologique. Ce thème de recherche s'inscrit dans le cadre général des "dommages induits par les radiations dans les systèmes bio moléculaires" et traite de l'interaction d'un rayonnement ionisant à l'échelle des molécules biologiques telles que les constituants de l'ADN. Le but de cette thématique est de réaliser un pont entre les interactions à l'échelle moléculaire et la radiobiologie. On se propose de caractériser la fragmentation induite par collision de petites bio-molécules, essentiellement des bases de l'ADN et de l'ARN, ainsi que l'émission d'électrons secondaires durant ces collisions. En effet, ces électrons secondaires de basse énergie sont probablement responsables de dégâts supplémentaires dans l'ADN, par attachement dissociatif ou par ionisation suivie de fragmentation. Il est important de connaître le spectre énergétique des électrons émis car ces processus dépendent fortement de leur énergie cinétique. Ces études sont menées par impact de proton à des énergies de collision voisines de 100 keV, ce domaine correspondant à la formation du pic de Bragg dans le milieu biologique où le projectile dépose une dose importante à une profondeur bien localisée (utilisé en proton thérapie). Nous collaborons avec le groupe de B. Farizon l'IPN de Lyon sur ce sujet.

Deux demandes de post-doc sur cette nouvelle thématique ont été faites au CNRS (post-doc 2005) et auprès de l'ARC, et n'ont pas abouti.

Notre équipe a été et est rattachée aux GDR 'Agrégats Dynamique et Réactivité' et 'Agrégation, Fragmentation et Thermodynamique des systèmes isolés' et aux programmes Européen 'LEIF' 2000-2003 qui a été reconduit pour la période 2006-2009 ainsi qu'au réseau Européen COST P9 'Radiation damage in biomolecular systems'—RADAM- site web : <http://www.isa.au.dk/cost/home.html>

7.2.2. Spectroscopie haute résolution des séries $1s^23lnl'$ de l'oxygène et du néon. [1],[2],[3],[6]

La réaction étudiée est la double capture électronique par un ion multichargé héliumoïde (cœur $1s^2$) suivie d'une autoionisation vers les continua d'ionisation les plus proches $1s^22lel'$, par exemple :



Ces expériences ont été réalisées en 1998 à l'AIM (Accélérateur d'Ions Multichargés) au CEN de Grenoble mais ont été exploitées jusqu'en 2003. Peu de données théoriques fiables (énergies et durées de vie des états diexcités) sont disponibles pour analyser de tels spectres d'électrons issus de l'autoionisation des séries de Rydberg $1s^23lnl'$ et donc permettre d'étudier quantitativement le processus de double capture par spectroscopie d'électrons (populations des états, alignement, ...). Les tests antérieurs par d'autres auteurs de ces données théoriques sont trop imprécis pour permettre de conclure sur la validité de certains calculs.

Par une méthode de modélisation des spectres d'électrons, nous avons pu tester pour la première fois toutes les données disponibles concernant les positions et durées de vie d'un grand nombre d'états singulets des séries de Rydberg $1s^23lnl' \ ^1L$ ($n = 3$ à 5) calculées par divers auteurs. La haute résolution qui a été atteinte a permis d'observer l'autoionisation vers les composantes de structure fine de l'état final $1s^22p_j$. A partir d'une telle modélisation beaucoup de renseignements spectroscopiques ou collisionnels peuvent être obtenus. Ne seront donnés ici à titre d'exemple que les tests spectroscopiques. Les positions des états mesurés, déduites des positions des raies d'électrons observées qui sont décalées et déformées par une interaction coulombienne avec l'ion cible résiduel (effet PCI), sont en très bon accord avec certaines données théoriques, souvent à mieux que 0.05 eV. Ce chiffre montre la précision atteinte dans nos mesures et dans la méthode d'analyse ; seulement une précision de l'ordre de 0.3 eV était auparavant atteinte qui ne permettait pas une identification correcte des transitions et donc des états peuplés dans la réaction. Cette identification a alors permis de déduire d'autres données telles que le rapport de branchement pour l'autoionisation vers les continua $1s^22s$ et $1s^22p$; les données théoriques pour l'oxygène sont en bon accord entre elles ainsi qu'avec nos expériences.

Cette activité est maintenant totalement arrêtée.

7.2.3. Collisions ion-fullerènes

Les réactions avec les ions légers aux énergies considérées sont dues aux excitations électroniques et le temps de collision (\approx fs) est court devant le temps nécessaire à la fragmentation (\approx ps).

7.2.3.1. Mesures des sections efficaces absolues [8]

Jusqu'à lors, les données expérimentales concernant les taux de production des divers fragments étaient donnés en taux relatifs excluant une comparaison directe des systèmes en unité absolue. Nous donc avons entrepris de relier tous les systèmes collisionnels entre eux et l'obtention des sections efficaces en unité absolue s'est faite via la collision $H^+ + C_{60}$ où des données existaient entre 0.2 et 2MeV (Japon). Ces données ont servi à une équipe de Bielefeld qui ont prolongé les sections efficaces jusqu'à 100keV. Désormais les sections efficaces de production d'états de charges sont connues entre 1keV et 2MeV pour ce système. Les résultats sont donnés sur la figure 1 : un bon accord est obtenu sur les sections efficaces

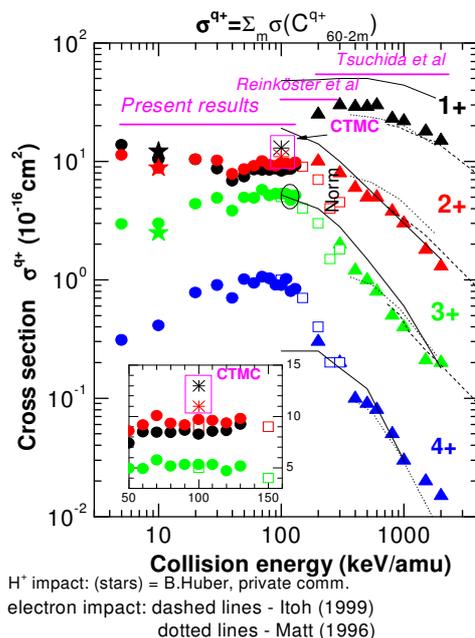


Figure 1 : Sections efficaces de production de charge dans le système $H^+ + C_{60}$

σ^{q+} avec $q > 1$ mais un facteur 2 persiste entre nos valeurs et celles de Tsuchida pour la production de $1+$. Nous avons réalisé un calcul CTMC (Classical Trajectory Monte Carlo method) basé sur un modèle de jellium du C_{60} existant dans la littérature pour évaluer les sections efficaces de production des ions $1+$ et $2+$: un bon accord a été obtenu.

Les corrélations electron-fragments nous ont permis de séparer les contributions dues à la capture et à l'ionisation dans la formation du C_{60}^+ , et ont montré une loi d'échelle avec la vitesse de collision valable pour tous les ions projectiles (y compris les ions moléculaires). Ceci montre que la structure du projectile n'intervient pas, i.e. que les collisions se passent à grand paramètre d'impact où, de plus, l'énergie déposée est faible.

En ce qui concerne le processus de multifragmentation où la molécule de C_{60} est complètement détruite, les sections efficaces correspondantes évoluent rapidement avec la vitesse de collision ainsi qu'avec le système collisionnel. Pour H^+ , la section efficace passe par un maximum situé aux alentours de 60keV/u, dans le cas de H_2^+ et H_3^+ , les sections efficaces sont plus importantes et augmentent très rapidement avec l'énergie de collision, un maximum semble se dessiner pour H_2 à la même vitesse que pour H tandis que H_3 ne présente aucun maximum dans le domaine énergétique considéré. Cette relation d'ordre entre les sections efficaces pour H , H_2 , H_3 est analogue à l'énergie déposée dans la collision. Pour les ions Hélium, les sections efficaces dépendent fortement de la charge, et si la dépendance

obtenue pour He^+ est voisine de H_3^+ , la section efficace de multifragmentation pour He^{2+} est constante à partir de 20keV/uma et voisine de la section géométrique du $C_{60} = \pi \cdot \langle R_{C60} \rangle^2$.

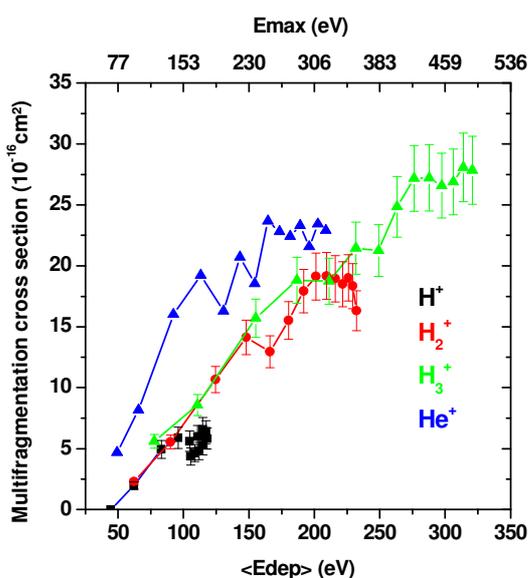


Figure 2 : Dépendance des sections efficaces de multi-fragmentation en fonction de l'énergie déposée moyenne $\langle E_{dep} \rangle$

Si l'on représente les sections efficaces de multifragmentation non plus en fonction de paramètres cinématiques (vitesse de collision...) mais en fonction de l'énergie déposée, une loi commune est observée. On notera tout de même un léger décalage de la courbe avec He^+ comme projectile.

Nous avons aussi étudié le système collisionnel $He^{2+} + C_{60}$ suite à une collaboration théorie-expérience engagée avec l'équipe hispano-française (Univ Autonoma de Madrid, Univ. de Metz, Univ ParisVI), sur la comparaison des sections efficaces de simple et double capture. La difficulté expérimentale a été de descendre en énergie jusqu'à 2keV, limite initiale supérieure des calculs moléculaires. Les calculs ont porté sur la formation des ions He^+ (simple capture) et He^0 (double capture), les mesures sur les sections efficaces absolues de formation des ions C_{60}^+ et C_{60}^{2+} (on observe très peu de fragmentation). Grâce aux expériences d'Afrosimov en unité relative, il est possible de relier l'état de charge de l'Hélium après collision et la charge du fullerène. Comme l'on peut le constater sur la figure3, un accord expérience-theorie remarquable est obtenu compte-tenu de la complexité du système (la partie théorique a nécessité deux années de travail). Une publication commune va être rédigée prochainement.

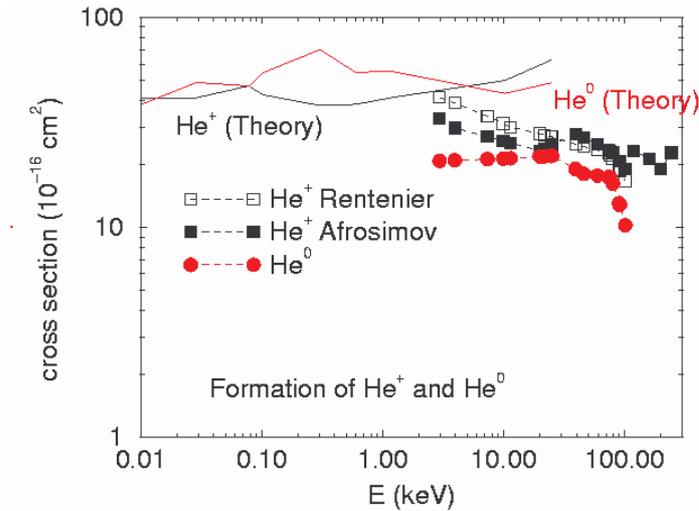


Figure 3 : Comparaison theorie-experience des sections efficaces de capture électronique dans la collision ${}^4\text{He}^{2+} + \text{C}_{60}$

7.2.3.2. Fragmentation du C_{60}

7.2.3.2.1. Fission asymétrique et évaporation des ions C_{60}^{r+} ($r = 2-4$) * [6], [11], [12]

Grâce à l'amélioration de notre dispositif expérimental, nous avons pu pour la première fois donner une description complète de la fission asymétrique des ions C_{60}^{2+} . Cela nous a permis de comparer les distributions de masses corrélées fragment léger- fragment lourd en fonction de la charge initiale du fullerène. Lorsque la charge du fullerène augmente, la taille du fragment lourd augmente (et la taille du fragment léger diminue). Par contre les distributions de taille corrélées à une taille de fragment donné sont identiques ! Si l'on compare ces mêmes distributions avec d'autres systèmes collisionnels pouvant donner lieu à des transferts énergétiques plus importants (collision avec H_2 et H_3) les mêmes résultats sont obtenus et il en est de même pour des ions multichargés de basse vitesse (résultat de S.Martin et al du LASIM, Lyon). Ce comportement 'universel' du processus de fission semble paradoxal du fait que les rapports de branchement doivent dépendre de l'énergie interne – température- du fullerène (description d'Arrhenius, RRK...). L'interprétation que nous avançons est que lorsque l'énergie interne augmente, les ions C_{60} vont rester stables sur la durée d'observation, ensuite les processus 'doux' de fission et d'évaporation vont prendre le relais mais si l'énergie interne devient suffisante la voie de fragmentation par multifragmentation devient dominante et des lors les voies de fission/évaporation n'existent que dans un domaine limité d'énergie interne que nous avons évalué s'étendre entre 40 et 80 eV.

7.2.3.2.2. Multifragmentation : distribution de taille et multiplicité [5], [11]

Nos résultats ont montré que la distribution en taille des fragments obéit à une loi d'échelle si l'on considère l'énergie déposée comme paramètre et est donc indépendante du type de projectile (une dépendance du même type a été vu sur les sections efficaces de multifragmentation figure 2). Nous avons aussi réalisé une étude de la multifragmentation au travers de la théorie de la percolation qui est souvent utilisée pour caractériser les distributions en taille des fragments (en particulier en physique nucléaire) et nous avons regardé si nos données étaient compatibles ou non avec un comportement critique. Cela a été réalisé grâce à une analyse événement par événement de la fragmentation en suivant les méthodes suggérées par Campi et Bauer qui utilisent les corrélations entre moments d'ordre k correspondant à chaque événement. Les logarithmes des moments d'ordre 3 et 5 en

fonction du log du moment d'ordre 2 sont donnés sur la figure4 : une loi linéaire est obtenue, compatible avec un comportement critique de la fragmentation du C₆₀.

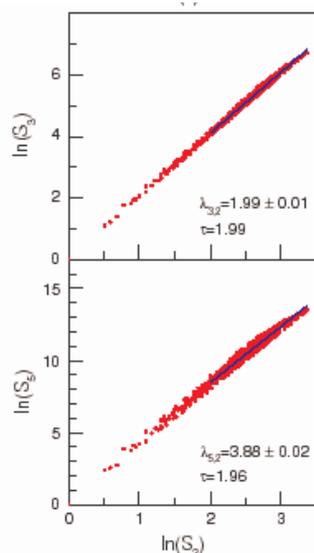


Figure4 : Ln des moments d'ordre 3 et 5 vs le Ln du moment d'ordre 2 (chaque point représente un événement)

A partir de ces pentes on peut extraire l'exposant critique $\tau=1.98\pm 0.02$ qui se trouve être plus proche de celui calculé pour un réseau 2D (2.06) que pour un réseau 3D (2.2) en accord avec le fait que le C₆₀ est un objet 2D (coquille creuse). Cette étude a suscité de nombreuses discussions fructueuses avec M. Belkacem du Laboratoire de Physique Théorique (IRSAMC).

7.2.3.3. Energétique des particules émises

7.2.3.3.1. Les fragments [7]

Lors de la fragmentation de la molécule de C₆₀, les divers petits fragments ont une énergie cinétique non nulle. On s'est attaché à mesurer cette énergie cinétique pour les petits agrégats de carbone C_n⁺, n=1..12 et voir comment évoluent ces énergies avec les conditions expérimentales. La distribution en énergie des fragments est obtenue à partir des spectres de temps de vol : on génère par simulation Monte-Carlo des spectres de temps de vol pour un fragment donné émis isotropiquement avec des énergies cinétiques données, puis on décrit le spectre mesuré par une combinaison linéaire des spectres calculés, l'ensemble des coefficients représentant le spectre en énergie. La compilation des énergies cinétiques les plus probables ainsi que les moments emportés par les fragments montre que tous les fragments ont approximativement la même quantité de mouvement quelle que soit leur taille, il en résulte une énergie cinétique inversement proportionnelle à la masse et ce quel que soit le système collisionnel. Ceci montre que l'énergie cinétique des fragments est uniquement une caractéristique moléculaire telle que le KER. Un modèle simple de l'explosion coulombienne à 2, 3 et 4 fragments est réalisé en supposant que les fragments de masse m₁...m_n sont situés sur une sphère du même rayon que le C₆₀ et se repoussent (plus grande distance entre les fragments). Après évolution des équations du mouvement et moyenne sur les n-1 autres masses, on peut déduire la variation de la quantité de mouvement et de l'énergie cinétique en fonction de la masse des fragments : un bon accord quantitatif est obtenu même si la variation en énergie cinétique calculée varie moins vite (n^{-1/2}) que la dépendance expérimentale (n⁻¹)

7.2.3.3.2. Les électrons [8]

Dans la grande majorité des collisions, de nombreux électrons sont émis. Si de nombreuses études ont eu lieu sur la caractérisation de l'état du fullerène après excitation, la caractérisation des électrons émis n'a reçu que peu d'intérêt (2 publiés recensés !!!), nous

avons donc réalisé une étude systématique de spectrométrie d'électrons afin de voir si ceux-ci amènent une information particulière. Les spectres d'électron se distinguent de ceux obtenus avec les atomes par un déficit d'électrons de faibles énergies (qui ne peut être attribué à un problème expérimental d'efficacité) et présente un maximum situé au voisinage de 10-20eV. Ce déficit en électron de faibles énergies a été reproduit par nos calculs CTMC à partir d'un modèle jellium du C_{60} , et provient des moments angulaires élevés des orbitales externes qui forment une barrière de potentiel centrifuge élevée. Nous avons ensuite réalisé un calcul quantique des spectres d'électrons (SCA-PWBA), et les mêmes résultats qualitatifs sont obtenus sur le déficit des électrons de basse énergie. En revanche, on assiste à l'apparition de résonances de formes conduisant à des raies sur le spectre calculé. Ce type de résonances a aussi été observé dans des calculs plus complexes impliquant une description plus réaliste du fullerène (Gianturco et al). Nous ne les avons pas mises en évidence expérimentalement, nous pensons que cela vient que nos C_{60} ne sont pas froids : ils vibrent et les résonances se brouillent.

Afin de relier la spectroscopie d'électrons et la fragmentation de la molécule, nous avons réalisé une expérience de spectrométrie en corrélation dans la collision $H_3^+ + C_{60}$ à 60keV qui a montré que plus le processus de fragmentation est violent et correspond à des dépôts d'énergie important, plus les électrons ont d'énergie cinétique. Il y a donc bien une liaison entre les deux aspects (voir figure5) où l'on considère un mécanisme à faible dépôt d'énergie i.e. formation de C_{60}^+ et un mécanisme à fort dépôt d'énergie i.e. la multifragmentation. Via le modèle de gaz d'électrons libres formulé par Lindhart et Winter appliqué au C_{60} , nous avons montré qu'un fort dépôt d'énergie se fait pour des paramètres d'impact $b \approx 6ua$ tandis que peu d'énergie est déposée pour des $b > 8ua$. Les calculs SCA des spectres d'électrons résolus en paramètres d'impact illustrent cet état de fait : le paramètre clé est le paramètre d'impact de la collision.

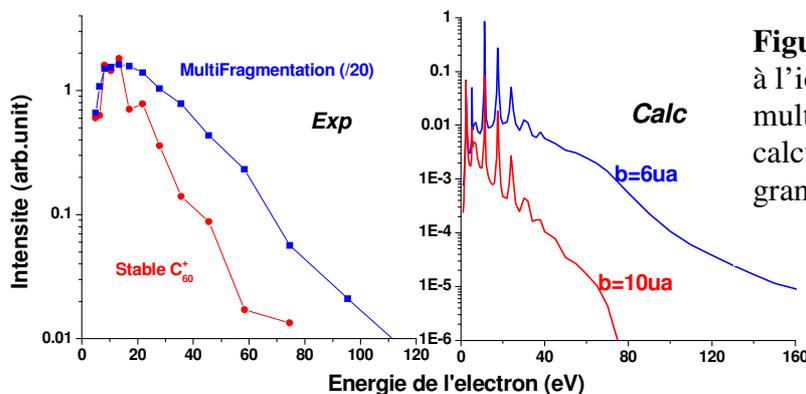


Figure 5 : Spectre d'électron associé à l'ionisation simple du C_{60} et à la multifragmentation (gauche). A droite calculs des spectres électroniques à grand et moyen paramètre d'impact

7.2.4. Collisions Proton-Biomolécules

Les effets génotoxiques des radiations ionisantes sont produits non seulement par l'impact direct des radiations ionisantes, mais sont aussi induits par des espèces secondaires. Il a récemment été suggéré par L.Sanche du dpt de Radiobiologie de l'Université de Sherbrooke (Canada) que les cassures simple et double brins de l'ADN induites par des électrons de faibles énergies (eV) pouvaient être expliquées par un mécanisme d'attachement dissociatif sur les bases de l'ADN, que l'on reproduit sur les bases isolées. Ainsi les dommages induits par les radiations peuvent être compris par des mécanismes au niveau de la molécule unique. A noter que dans les années 1990, l'équipe de A.Chetioui (GPS) avait relié

la mort cellulaire après exposition à des rayonnements X à un processus élémentaire de physique atomique : l'ionisation en couche interne et la cascade Auger qui en découle.

La mort cellulaire étant due aux altérations de l'ADN qui est la cible principale des radiations, nous nous intéressons aux réactions proton-petites bio-molécules en phase gaz. Nous travaillons sur les bases de l'ADN (thymine, cytosine, adénine, guanine) ainsi que sur l'uracil (base de l'ARN) dont nous caractérisons la fragmentation moléculaire ainsi que l'émission électronique –nous sommes les seuls à le faire-. Des prémanips sur l'uracil ont été entreprises début 2004 et les expériences proprement dites ont débuté avec l'arrivée de A. Le Padellec dans l'équipe.

7.2.4.1. Fragmentation moléculaire

Les jets de bases d'ADN, ARN sont produits par sublimation de poudres commerciales, et une première étape a consisté à connaître les températures de fonctionnement de notre four pour chaque molécule qui seront appliquées pour la mesure des spectres électroniques. Ces tests sont faits par spectro de masses et ont naturellement conduit à l'étude de la fragmentation induite par collision dans le domaine 25-100 keV. Une illustration des spectres de temps de vol issus de la fragmentation des bases pyrimidiques est donnée dans la figure 6 (les bases puriques ont été aussi étudiées). Contrairement à ce que l'on observe dans les collisions avec le C₆₀, il n'y a pas de modifications significatives des spectres de masses avec l'énergie d'impact dans le domaine 25-100keV. On notera aussi que, bien que les molécules aient une structure voisine, les spectres de masse sont assez différents et que de nombreux fragments sont créés que nous pouvons identifier et quantifier. En particulier certains fragments montrent l'existence de réarrangement moléculaire (notamment la masse 44 pouvant être attribué à l'espèce CNOH₂⁺). Ces fragments dans la molécule d'ADN pourront à leur tour faire des dégâts supplémentaires (attaque chimique).

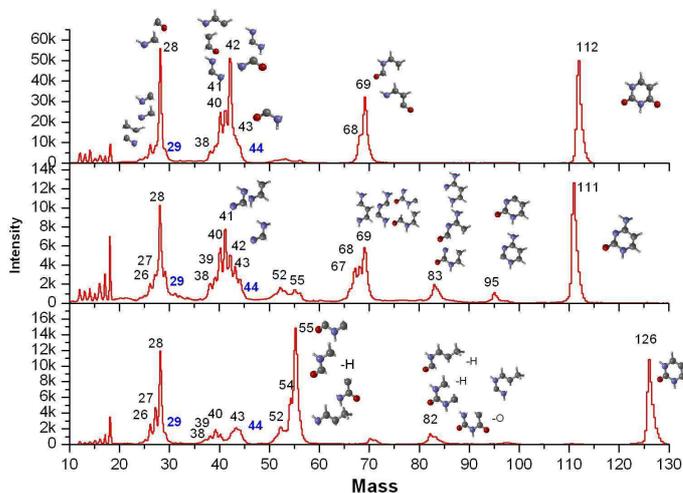


Figure 6 : Spectres de fragmentation de l'Uracil, Cytosine et Thymine

Les molécules multi-ionisées peuvent se relaxer en émettant plusieurs fragments chargés, accessibles à nos techniques de multicorrélation. On a accès en particulier aux rapports de branchement des différentes voies de dissociation et, par exemple, les couples de fragments chargés 28+43 et 28+41, 40+43 sont préférentiellement observés dans le cas de la thymine et cytosine, respectivement. L'énergétique de la dissociation peut être obtenue par l'examen des îlots de corrélation et outre la connaissance des énergies cinétiques (de l'ordre de l'eV) emportés par les fragments, on peut obtenir des renseignements supplémentaires sur la forme des fragments émis. L'analyse de traces 'parasites' dans les spectres de corrélation a mis en évidence, dans le cas de l'Adénine, l'existence d'états métastables de durée de vie de l'ordre de la 100ns quant à la fragmentation (figure7).

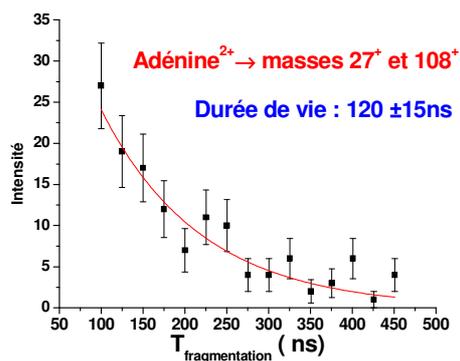


Figure 7 : mise en évidence d'états de longue durée de vie quant à la fragmentation

7.2.4.2. Emission électronique

L'importance des électrons secondaires émis à la suite de l'interaction d'un rayonnement ionisant avec le milieu biologique a été récemment démontrée par l'équipe de L. Sanche du dept de radiobiologie de l'Univ. de Sherbrooke (Canada), et les dommages qu'ils vont pouvoir générer au niveau de l'ADN par cassure simple et double brins dépendent de leurs énergies cinétiques. A basse énergie cinétique (<20 eV) le mécanisme d'attachement dissociatif sur les bases va être important tandis qu'à plus forte énergie (<50 eV) les processus d'ionisation et de fragmentation 'directe' vont prédominer. Il est donc nécessaire de connaître le spectre en énergie des électrons éjectés mais aussi les rendements absolus (sections efficaces doublement différentielle) pour pouvoir comparer les molécules entre elles. Les spectres d'électrons ont été obtenus de manière comparable cible par cible en supposant (et vérifiant) la non-dérive en densité du jet puis la normalisation en section absolue s'est faite via le système collisionnel H_3^+ base à 25 keV. Calant le spectromètre d'électron à 50 eV, nous avons, en parallèle, monitoré la diffusion élastique des protons du projectile à 90° (H_3 comme projectile est équivalent à 3 H à 8.3 keV i.e. un 'faisceau' 3 fois plus important pour une énergie 3 fois plus basse où la section efficace de diffusion est plus importante) : le lien entre ces deux intensités électronique et proton diffusé dépend, entre autre, de la section efficace de diffusion élastique et aussi du profil de densité du jet issu du four. Les sections efficaces de diffusion élastique ont été évaluées avec l'aide de P. Caffarelli de l'équipe ion-surface du LCAR et nous avons fait appel au Dr A. Bouckabache du LAAS (Laboratoire d'Automatisme et d'Analyse des Systèmes) de Toulouse qui a réalisé pour nous des mesures d'épaisseur de dépôt d'Uracil sur plaque de verre.

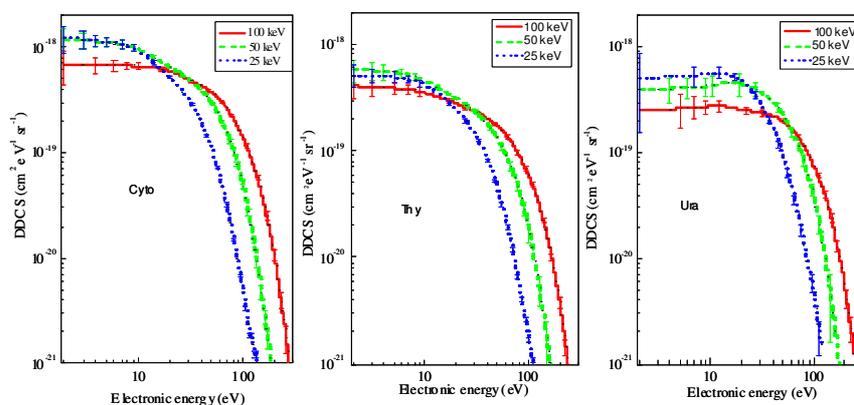


Figure 8 : spectre d'électrons mesurés à 35° dans les collisions proton-bases pyrimidique

Nos résultats montrent une forte production d'électrons de faible énergie quelles que soient les bases considérées (la spectroscopie électronique n'a pas encore été réalisée sur l'adénine et la guanine)

7.2.5. Projets

7.2.5.1. Fullerènes et molécules associées

Les molécules de fullerènes sont, depuis une vingtaine d'années, le sujet de nombreuses études. Parmi celles-ci, un certain nombre avait pour but de la création d'endofullerènes (piégeage d'un atome dans la cage du fullerène). En effet, la réactivité et le processus de formation de ces derniers ont notamment un intérêt pour la recherche médicale (amélioration des techniques d'imagerie ou nouvel agent thérapeutique). Il est également prédit que certains endofullerènes (utilisation d'atomes alcalins) posséderaient des propriétés 'super-conductrices'. Dans le cadre d'une collaboration avec le CIRIL (Caen) (B. Huber et B. Manil) nous nous proposons d'étudier la possible formation d'endofullerènes par collision entre une molécule de C_{60} et un ion possédant une énergie cinétique de l'ordre de quelques eV. Lors de cette collision, il est possible, par capture électronique, d'affaiblir certaines liaisons carbone-carbone du fullerène et d'obtenir ainsi un élargissement de l'un des hexagones ou pentagones formant le C_{60} . Celui-ci offrira la possibilité au projectile de pénétrer à l'intérieur de la cage du fullerène, et d'y être stabilisé, vu sa très faible énergie cinétique. Cette expérience se déroulera sur la ligne TBE (Très Basse Energie) de l'installation ARIBE (Accélérateur pour les Recherches Interdisciplinaires avec des ions de Basse Energie) de Caen, qui permet de produire des faisceaux d'ions multichargés avec une énergie de l'ordre de 1 eV. La formation d'endofullerènes sera observée grâce à une spectrométrie de masse par temps de vol de haute résolution ; utilisation d'un spectromètre de type réflectron possédant une résolution en masse de l'ordre de 15000. Une demande de financement a été déposée et acceptée par le GDR 'Agrégation, Fragmentation et Thermodynamique des systèmes isolés' pour des rencontres préparatoires.

Une création de PPF par C. Joblin (CESR) et F. Spiegelman (LPQ, IRSAMC) portant sur 'Molécules et grains du laboratoire à l'Univers' est en cours de dépôt, et notre équipe participerait à la thématique 'Transfert d'énergie et fragmentation de macromolécules et nanograins'. Suite à la visite de C. Joblin, une collaboration concernant le corranulène est envisagée : nos études par impact d'ion sont complémentaires aux expériences de photoionisation et photodissociation menées au CESR. De plus le corranulène $C_{20}H_{10}$ représentant $1/3$ du C_{60} , il est très intéressant de comparer ces modes de fragmentation avec ceux du C_{60} .

7.2.5.2. Bio-molécules

La caractérisation 'complète' de l'émission électronique dans les collisions ion-biomolécule passe non seulement par la connaissance du spectre énergétique mais aussi par l'information angulaire, i.e. par la connaissance des distributions angulaire des électrons. Ces données sont importantes dans le calcul des traces des ions dans le milieu biologique. Ces études nécessitent le développement d'une nouvelle détection d'électrons qui mesure à la fois les énergies et les angles d'émission ainsi que la corrélation avec les modes de fragmentation. Cet appareillage, dont l'étude a commencé, sera transporté ou dupliqué pour aller sur le dispositif de B. et M. Farizon à l'IPN de Lyon, avec qui nous collaborons. Les expériences prévues avec le groupe de l'IPN concernent les collisions proton/ biomolécules solvatées (avec contrôle du nombre de molécules d'eau attachées) afin de mieux reproduire le milieu bio et de voir les modifications engendrées par la solvation sur les modes de fragmentation ainsi que sur l'émission d'électrons secondaires.

Sur notre dispositif de Toulouse, suite à une discussion avec M. Malet-Martino du laboratoire de 'Synthèse et Physico-Chimie de Molécules d'Intérêt Biologique' (SPCMIB, UPS) nous comptons nous intéresser aux Halo-Uracil tel que le 5FU. Cette molécule est

utilisée dans les traitements anti-cancer, et est radio sensibilisante, ie les effets des rayonnements ionisants sont augmentés en sa présence. Se pose alors la question de comprendre pourquoi une molécule est radio sensibilisante et nous allons chercher à voir s'il existe des particularités par rapport aux autres bases lorsque l'on irradie ce type de molécule. (Un effet particulier par irradiation électronique a été observé par l'équipe de T. Märk (Innsbruck). Vu la toxicité de ces molécules, un système de piège à froid doit être installé dans la chambre de collision.

Les dommages importants occasionnés à l'ADN et qui provoquent la mort cellulaire ou des mutations sont conditionnés par les cassures des brins de l'ADN. La structure la plus petite comportant l'élémentaire du brin est le nucléotide qui comporte un phosphate, un sucre (brin) auquel est attachée une base. Nous nous sommes procuré les nucléotides de l'adénine que l'on trouve dans l'ADN (damp) et l'ARN (amp) en version monohydraté ou non. Ceci nous permettra de voir l'influence du sucre mais aussi de la molécule d'eau. Les expériences sont prévues en phase gaz mais si les molécules sont trop délicates à sublimer correctement, nous envisageons de les déposer sur des surfaces pour pouvoir les irradier et les étudier.

Ceci est un des points de départ qui a suscité un rapprochement-fusion entre les équipes de collision du LCAR c'est à dire l'équipe 'Ion-Surface' dirigée par M. Richard-Viard et la nôtre. Ce rapprochement permet de réaliser des activités complémentaires phase gaz-phase déposée, et d'étendre les études à des systèmes plus complexes (et généralement plus fragiles) mais aussi de suppléer à la perte de chercheurs par départ à la retraite ainsi qu'à la difficulté de recrutement. Des pré-manips ont été réalisées quant à la diffusion d'ion Ar (4 keV) sur une surface d'or partiellement recouverte d'Uracil qui montrent la nécessité de préparer in situ le dépôt, et de chauffer très légèrement l'échantillon pour éviter pollution dans l'enceinte.

7.2.6. Activités extra équipe de A.Le Padellec

En marge des activités du groupe « Spectrométrie d'électrons dans les collisions » sur les molécules d'intérêt biologique, je poursuis des travaux dans le cadre de collaborations déjà bien établies sur les processus d'association ionisante à l'UCL en Belgique, ainsi que sur des collisions entre agrégats carbonés / hydrocarbonés et atomes d'hélium (étude de l'excitation, de la capture électronique et de la dissociation) au Tandem situé à l'université d'Orsay.

7.2.6.1 Processus d'association ionisante.

L'ensemble de ces travaux concerne le processus d'association ionisante qui associe une paire d'ions positif et négatif (atomes et/ou molécules) pour produire un ion moléculaire et un électron dans le canal de sortie. Nous avons mesuré les sections efficaces intégrales pour la formation d'un certain nombre d'ions diatomiques et triatomiques d'intérêt atmosphérique et astrophysique. Pour certains de ces derniers, nous avons pu mettre en évidence la compétition entre mécanismes d'abstraction et d'insertion dont relève le processus d'association ionisante.

De manière plus globale, mon intérêt pour ce travail a été avivé par une étude que j'avais menée antérieurement sur la formation en paire d'ions, processus inverse de celui d'association ionisante. L'opportunité d'étudier ces processus m'a amené à réfléchir et à approfondir le concept de bilan détaillé (principe de microréversibilité)

Collaboration avec :

- Groupe « Physique atomique et moléculaire » - PAMO de l'Université catholique de Louvain la Neuve (Dr X Urbain).

Cette collaboration a déjà donné lieu à cinq articles publiés dont quatre dans des journaux à comité de lecture :

- *EPJD* (2)

- *JPhysB* (1)

- *Phys.Scripta* en tant que seul auteur (1)

- *Kluwer Academic/Plenum Publishers* (Harbound, ISBN 0-306-47765-3, Août 2003, Ed: SL. Guberman - p.343 –) (1).

7.2.6.2. Collisions d'agrégats carbonés / hydrocarbonés sur des atomes d'hélium : capture, excitation, dissociation.

Cette collaboration a été initiée suite à un article publié en 2001 sur la destruction d'agrégats de carbone chargés négativement par impact électronique (« Electron Impact Detachment and Dissociation on C_4^- anions in the heavy ion storage ring CRYRING » by A. Le Padellec *et al*, *J. Chem. Phys.*, 115, 10671, (2001)). Je participe régulièrement depuis Juin 2003 aux campagnes de mesures au TANDEM d'Orsay (1 semaine par an). Expérimentalement, des détecteurs à barrière de surfaces sont mis à profit dans un régime courant-tension qui permet la reconnaissance de forme des signaux, et il est alors possible de mesurer les rapports de branchement dans les différents canaux de capture, d'excitation et de fragmentation. Une collaboration très active a lieu en parallèle avec des équipes théoriques, dont celle de F Spiegelman du LPQ UPS – Toulouse qui développe des théories statistiques et de chimie quantique.

Collaboration avec :

- Groupe LCAM / IPN de l'Université Paris 11 - Orsay (Drs Wohrer-Béroff et Chabot).

Cette collaboration a déjà donné lieu à trois articles publiés dont deux dans des journaux à comité de lecture :

- *PRL* (1)

- *PRA* (1 accepté)

- *World scientific* (1)

7.3. Les collaborations nationales et internationales

-F. Martin, M. Alcamí (UAM Madrid)-PA Hervieux (Univ. Strasbourg)-M.F. Politis (GPS, Paris) sur les interactions ions- C_{60} , fragmentation du C_{60} : énergie d'activation

-M. et B. Farizon (IPN, Lyon) sur les interactions avec les biomolécules

-Groupe « Physique atomique et moléculaire » - PAMO de l'Université catholique de Louvain la Neuve (Dr X Urbain).

-Groupe LCAM / IPN de l'Université Paris 11 - Orsay (Drs Wohrer-Béroff et Chabot).

7.4. Publications

7.4.1. Publications de l'équipe

7.4.1.1. Articles dans des revues avec comité de lecture

- [1] A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle and D. Bordenave-Montesquieu, 'Comments on Experimental study of single- and double-electron transfer in slow $\text{Ne}^{8+} + \text{He}$ collisions using photon and electron spectroscopy' *Phys. Rev. A* 65 (2002) 066701
- [2] A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle and D. Bordenave-Montesquieu, 'Part I - High resolution electron spectroscopy of the $1s^2 3lnl'$ Be-like series in oxygen and neon. Test of theoretical data. I-Experimental method and theoretical background.' *J. Phys. B* 36 (2003) 47-64
- [3] A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle and D. Bordenave-Montesquieu, 'Part II - High resolution electron spectroscopy of the $1s^2 3lnl'$ Be-like series in oxygen and neon. Test of theoretical data. II-Experimental results' *J. Phys. B* 36 (2003) 65-92
- [4] G. Laurent, M. Tarisien, X. Fléhard, P. Jardin, L. Guillaume, P. Sobocinski, L. Adoui, A. Bordenave-Montesquieu, D. Bordenave-Montesquieu, J.Y. Chesnel, F. Frémont, D. Hennecart, E. Liénard, L. Maunoury, P. Moretto-Capelle et A. Cassimi, 'Coincident Auger electron and recoil ion momentum spectroscopy for low-energy ion-atom collisions' *NIM B* 205 (2003) 546-549
- [5] A. Rentenier, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu and A. Bordenave-Montesquieu, 'Multifragmentation of C_{60} induced by He^{2+} impact ($E < 60 \text{ keV/u}$) and investigated by multicorrelation technique' *NIM B* 205 (2003) 656-660
- [6] A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle and D. Bordenave-Montesquieu, 'An accurate test of calculated positions and lifetimes for $\text{Ne}^{6+}(1s^2 3lnl')^1L$ states ($n=3-5$) using a high resolution electron spectroscopy' *NIM B* 205 (2003) 74-77
- [7] A. Rentenier, D. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle and A. Bordenave-Montesquieu, 'Kinetic energies of charged fragments resulting from multifragmentation and asymmetric fission of C_{60} molecule in collisions with monocharged ions (2 to 130 keV)' *J. Phys. B* 36 (2003) 1585-1602
- [8] P. Moretto-Capelle, A. Rentenier, D. Bordenave-Montesquieu, and A. Bordenave-Montesquieu, 'Electron capture, ionization and fragmentation in collisions of singly-charged ions with C_{60} ' *Physica Scripta*, Vol. T110 (2004) 325-331
- [9] A. Rentenier, A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle and D. Bordenave-Montesquieu, 'Asymmetric fission and evaporation of C_{60}^{q+} ($q=2-4$) fullerene ions in ion - C_{60} collisions. I- Present proton results' *J. Phys. B* 37 (2004) 2429-2454
- [10] A. Rentenier, A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle and D. Bordenave-Montesquieu, 'Asymmetric fission and evaporation of C_{60}^{q+} ($q=2-4$) fullerene ions in ion - C_{60} collisions. II- Dependent on collisional processes' *J. Phys. B* 37 (2004) 2455-2465

[11] A. Rentenier, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu and A. Bordenave-Montesquieu, 'Analysis of fragment size distribution in collisions of monocharged ions with C₆₀ molecule', J. Phys. B 38 (2005) 789-806

[12] D. Bordenave-Montesquieu, A. Bordenave-Montesquieu, A. Rentenier and P. Moretto-Capelle, 'Asymmetric fission and evaporation of C_{6q}⁺ (q=2-4) fullerene ions in ion – C₆₀ collisions. III- Universal collisional behaviour for fission' J. Phys. B 38 (2005) 1037-1049

[13] A. Le Padellec, 'Partial near threshold cross sections for the Associative Ionization to form CO⁺, NO⁺ and O₂⁺', Phys. Scripta 71(6), 621, (2005).

[14] F. Mezdari, K. Wohrer, M. Chabot, G. Martinet, S. Della Negra, P. Désesquelles and A. Le Padellec, 'Ionisation cross sections of small cationic carbon clusters in high energy collisions with helium atoms and stability of multiply charged species' *Accepté Phys. Rev. A*

7.4.1.2. Conférences invitées

P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu, A. Rentenier and A. Bordenave-Montesquieu 'Multi-fragmentation of C₆₀ induced by low charged ions' 3rd Annual LEIF Meeting (Igls/Innsbruck, Autriche 2002)

A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle, A. Rentenier and D. Bordenave-Montesquieu 'Electron spectroscopy and fragmentation of C₆₀ in collisions with monocharged ions', 4th Annual LEIF Meeting, (Belfast, Irlande, 2003)

P. Moretto-Capelle, A. Rentenier, D. Bordenave-Montesquieu, and A. Bordenave-Montesquieu 'Electron capture, ionization and fragmentation in collisions of singly-charged ions with C₆₀', 23th ICPEAC (Stockholm, Suede, 2003)

P. Moretto-Capelle, A. Rentenier, D. Bordenave-Montesquieu, and A. Bordenave-Montesquieu 'Secondary electron emission in proton-uracil collision: preliminary results' Radiation damage in biomolecular systems (Lyon, France, 2004) (*exposé donné par M. Richard-Viard*)

7.4.1.3. Posters

P. Moretto-Capelle, A. Rentenier, D. Bordenave-Montesquieu and A. Bordenave-Montesquieu 'Cross section for ion production in ⁴He²⁺+C₆₀ collision and comparison with H_n⁺ (n=1-3) impact (2 – 60 keV/amu)' 11th International Conf. on the Physics of Highly Charged Ions Caen (2002)

A. Rentenier, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu et A. Bordenave-Montesquieu 'Ionisation et fragmentation du C₆₀ induite par collisions avec des ions multichargés', PAMO (Bourges, 2002)

P. Moretto-Capelle, A. Rentenier, D. Bordenave-Montesquieu and A. Bordenave-Montesquieu 'Ionization, capture and fragmentation cross sections in collisions between singly charged ions and C₆₀ (2 -130 KeV)' 23th ICPEAC (2003) Stockholm

A. Rentenier, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu and A. Bordenave-Montesquieu, 'Fragmentation of fullerene C60 studied with percolation theory: presence of a critical behaviour?' 8th ECAMP (Rennes-France) (2004)

A. Rentenier, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu and A. Bordenave-Montesquieu, 'Electron emission correlated to fragmentation in H3+C60 collision' 8th ECAMP (Rennes-France) (2004)

A. Le Padellec, P. Moretto-Capelle, 'Collisions between protons and biomolecules: electron emission and molecular fragmentation' Radiation damage in biomolecular systems (Postdam, Allemagne, 2005)

F. Mezdari, G. Martinet, S. Della Negra, H. Hamrita, L. Lavergne, P. Désesquelles, A. Le Padellec, D. Gardès, M. Barat, M. Chabot and K. Wohrer, 'Fragmentation of multiply-charged carbon clusters' ICPEAC 2005 , Rosario, (Argentine) 20-26 July 2005

F. Mezdari, G. Martinet, S. Della Negra, H. Hamrita, L. Lavergne, P. Désesquelles, A. Le Padellec, D. Gardès, M. Barat, M. Chabot, K. Wohrer, S. Diaz-Tendero, P.A. Hervieux, M. Alcami, and F. Martin, 'Charge transfer in high velocity C_N⁺ - He collisions' ICPEAC 2005 - Rosario, (Argentine) 2005

M. Chabot, F. Mezdari, G. Martinet, K. Wohrer-Béroff, S. Della Negra, P. Désesquelles, H. Hamrita, A. Le Padellec, L. Montagnon, S. Diaz-Tendero, M. Alcami, P.A. Hervieux and F. Martin, 'Fragmentation of small carbon clusters' ICPEAC 2005 Rosario, (Argentine) 2005

7.4.1.4. Communications orales, séminaires, thèse

P. Moretto-Capelle, 'Dépôt d'énergie et fragmentation dans les collisions ions-C₆₀ (domaine du keV)' IPN Lyon Janv 2002

A. Rentenier, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu et A. Bordenave-Montesquieu, 'Mesure de la température et évolution du C₆₀^{q+}' GDR Agrégats (Paris, 2003)

P. Moretto-Capelle, 'Electron spectroscopy in collision : from C60 to biomolecules' KVI, Groningen, Pays-Bas, mars 2004

A. Rentenier, 'Fragmentation de la molécule C₆₀ par impact d'ions légers étudiée en multicorrélation. Sections efficaces, spectroscopie d'électron' these de l'universite Paul Sabatier Avril 2004

7.4.2. Publications de A. Le Padellec avant son arrivée dans l'équipe

7.4.2.1. Articles dans des revues avec comité de lecture

- [1] T. Nzeyimana, E.A. Naji, X. Urbain and A. Le Padellec, 'Merged beam study of the associative ionisation (C^+ , N^+ and O^+) + O^- ', *Eur. Phys. J. D*, 19, 315, (2002)
- [2] A. Le Padellec, G.F. Collins, H. Danared, A. Källberg, F. Hellberg, K. Andersson, D. Hanstorp and M. Larsson, "Relative cross sections for the Electron Impact Single Detachment on Li^- ", *J. Phys. B*, 35, 3669, (2002).
- [3] E.A. Naji, T. Nzeyimana, X. Urbain and A. Le Padellec, "Merged beam study of the associative ionisation O^-+D^+/O^++D^- and C^++D^- ", *J. Phys. B*, 35, 4325, (2002).
- [4] A. Al-Khalili, S. Rosen, H. Danared, A.M. Derkatch, A. Källberg, M. Larsson, A. Le Padellec, A. Neau, J. Semaniak, R. Thomas, M. af Ugglas, L. Vikor, W. Zong, W.J. van der Zande, X. Urbain, M.J. Jensen, R.C. Bilodeau, O. Heber, H.B. Pedersen, C.P. Safvan, L. Andersen, M. Lange, J. Levin, G. Gwinner, L. Knoll, M. Scheffel, D. Schwalm, R. Wester, D. Zajfman and A. Wolf, 'Absolute High-Resolution Rate Coefficients for Dissociative Recombination of Electrons with HD^+ : Comparison of Results from Three Heavy Ion Storage Rings', *Phys. Rev. A*, 68, 042702, (2003).
- [5] K. Fritioff, D. Hanstorp, J. Sandström, A. Ehlerding, M. Larsson, G.F. Collins, D.J. Pegg, H. Danared, A. Källberg and A. Le Padellec, "Electron-impact detachment of Cl^- ", *Phys. Rev. A*, 68, 012712, (2003).
- [6] K. Fritioff, J. Sandström, P. Andersson, D. Hanstorp, F. Hellberg, R. Thomas, W. Geppert, M. Larsson, F. Osterdahl, G.F. Collins, A. Le Padellec, D.J. Pegg, N.D. Gibson, H. Danared and A. Källberg, "Observation of an excited C_4^{2-} ion", *J. Phys. B*, 37, 2241, (2004).
- [7] G. Martinet, S. Diaz-Tendero, M. Chabot, K. Wohrer, S. Della Negra, F. Mezdari, H. Hamrita, P. Désesquelles, A. Le Padellec, D. Gardés, L. Lavergne, G. Lalu, X. Grave, J. F. Clavelin, P. A. Hervieux, M. Alcamí and F. Martin, «Fragmentation of highly excited small neutral carbon clusters», *Phys. Rev. Lett.*, 93(6), 063401, (2004).
- [8] E.M. Staicu-Casagrande, T. Nzeyimana, E.A. Naji, N. de Ruelle, B. Fabre, A. Le Padellec and X. Urbain, "Abstraction and insertion mechanisms in reactive collisions between H_2^+ or D_2^+ and O^- " *Eur. Phys. J. D*, 31(3), 469, (2004).

7.4.2.2. Articles dans des livres à comité de lecture

A. Le Padellec, "Studies of electron collisions with CN^+ , CN^- and HCN^+/HNC^+ " "Dissociative Recombination of Molecular Ions with Electrons" Kluwer Academic / Plenum Publishers, Harbound, ISBN 0-306-47765-3, Août 2003, Editeur : Steven L. Guberman - p.109 –

A. Le Padellec, X. Urbain, T. Nzeyimana and E.A. Naji, "Merged beam studies of associative ionization" "Dissociative Recombination of Molecular Ions with Electrons" Kluwer Academic / Plenum Publishers, Harbound, ISBN 0-306-47765-3, Août 2003, Editeur : Steven L. Guberman - p.343

A. Le Padellec, F. Rabilloud, D. Pegg, K. Andersson, D. Hanstorp, A. Neau, M. Larsson, F. Hellberg and R. Thomas, "Electron collisions with C_4^- : detachment process and resonant structure", "Dissociative Recombination of Molecular Ions with Electrons" Kluwer Academic / Plenum Publishers, Harbound, ISBN 0-306-47765-3, Août 2003, Editeur : Steven L. Guberman - p.441-

7.4.2.3. Actes de congrès

A Le Padellec, X Urbain, T. Nzeyimana and E-A. Naji, "Etude de l'association ionisante en faisceaux confluents", "PAMO 2002 – JSM 2002" Bourges, (France) 01-03 Juillet 2002

E.M. Staicu-Casagrande, N. de Ruelle, A. Le Padellec, E-A. Naji, T. Nzeyimana and X. Urbain, "Merged-beam study of associative ionization in collisions of C^- with C^+ , N^+ and O^+ " "International Scientific Meeting – SBP", Ghent University, (Belgium) 27-28 May 2003

E.M. Staicu-Casagrande, N. de Ruelle, A. Le Padellec, E-A. Naji, T. Nzeyimana and X. Urbain, "Merged-beam study of associative ionization in collisions of C^- with C^+ , N^+ and O^+ ", "ICPEAC 2003 - XXIII International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions", Stockholm, (Suède) 23-29 July 2003

M.E. Staicu-Casagrande, T. Nzeyimana, E.-A. Naji, A. Le Padellec and X. Urbain, "Insertion and abstraction mechanisms in collisions of O^- with H_2^+ and CH^+ ", "ETR Summer School & Network Meeting", University College London, (Grande Bretagne) 01-05 Septembre 2003

F. Mezdari, G. Martinet, M. Chabot, K. Wohrer, S. Della Negra, H. Hamrita and A. Le Padellec, "Carbon clusters-atom collisions at intermediate velocity" "ECAMP VIII – The eighth European Conference on Atomic and Molecular Physics" Rennes (France) 6 - 10 Juillet 2004

G. Martinet, S. Diaz-Tendero, M. Chabot, K. Wohrer, S. Della Negra, F. Mezdari, H. Hamrita, P. Desquenelles, A. Le Padellec, D. Gardes, L. Lavergne, G. Lalu, X. Grave, J.F. Clavelin, P.A. Hervieux, A. Alcamí and F. Martin, "Fragmentation of small neutral carbon clusters", "ECAMP VIII – The eighth European Conference on Atomic and Molecular Physics" Rennes (France) 6 - 10 Juillet 2004

E.M. Staicu-Casagrande, T. Nzeyimana, E.A. Naji, A. Le Padellec and X. Urbain "Insertion and abstraction mechanisms in collisions of O^- with H_2^+ and CH^+ " "ECAMP VIII - The eighth European Conference on Atomic and Molecular Physics" Rennes (France) 6 - 10 Juillet 2004

11. Publications de l'ensemble du laboratoire

11.1. Publications dans des revues avec comité de lecture

2002

- [J1] **G. Balint-Kurti, A. J. Orr-Ewing, J. A. Beswick, A. Brown, O. S. Vasyuntinskii**
Vector correlations and alignment parameters in the Photodissociation of HF and DF
J. Chem. Phys. **116**, 10760 (2002).
- [J2] **A. Bastida, J. Zuñiga, A. Requena, B. Miguel, J. A. Beswick, J. Vigué, N. Halberstadt**
Molecular dynamics simulation of the $I_2(x)\dots Ar$ isomers population in a free jet expansion: thermodynamics versus kinetic control
J. Chem. Phys. **116**, 1944-53 (2002).
- [J3] **J. A. Beswick**
Quantum hopping techniques applied to vibrational energy transfer
Comp. Phys. Comm. **145**, 64-77 (2002).
- [J4] **A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu**
Comment on 'Experimental study of single-and double-electron transfer in slow $Ne^{8+} + He$ collisions using photon and electron spectroscopy'
Phys. Rev. A **65**, 066701/1-4 (2002).
- [J5] **M. A. Bouchene**
Dynamique et interférences de paquets d'ondes dans les alcalins
Ann. Phys. **27**, 1-58 (2002).
- [J6] **M. A. Bouchene**
Phase Control of Dispersion Effects for an Ultrashort Pulse-train Propagating in a Resonant Medium
Phys. Rev. A **66**, 065801/1-4 (2002).
- [J7] **H. F. Busnengo, E. Pijper, M. F. Somers, G. J. Kroes, A. Salin, R. A. Olsen, D. Lemoine, W. Dong**
Six-dimensional quantum and classical dynamics study of $H_2(v=0, J=0)$ from Pd(111)
Chem. Phys. Lett. **356**, 515-22 (2002).
- [J8] **J. Degert, W. Wohlleben, B. Chatel, M. Motzkus, B. Girard**
Realization of a time domain Fresnel lens with coherent control
Phys. Rev. Lett. **89**, 203003/1-4 (2002).
- [J9] **J. C. Delagnes, M. A. Bouchene**
Compensation of electron wave packet spreading with linearly chirped pulses : theoretical analysis
J. Phys. B **35**, 1819-30 (2002).
- [J10] **R. Delhuille, C. Champenois, M. Büchner, L. Jozefowski, C. Rizzo, G. Trévec, J. Vigué**
Hith-Contrast Mach-Zehnder lithium-atom interferometer in the Bragg regime
Applied Physics B **74**, 489-93 (2002).

- [J11] **R. Delhuille, A. Miffre, E. Lavalette, M. Büchner, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué, H. J. Loesch, J. P. Gauyacq**
Optimization of a Langmuir-Taylor detector for Lithium
Review of Scientific Instruments **73**, 2249-58 (2002).
- [J12] **D. Field, N. C. Jones, J. P. Ziesel, T. A. Field**
Cold collisions of electrons with molecules
Few-Body Systems **31**, 191-7 (2002).
- [J13] **D. Field, N. C. Jones, J. P. Ziesel, T. A. Field**
Giant resonances in cold electron scattering by CS₂
Phys. Rev. Lett. **89**, 093201/1-4 (2002).
- [J14] **E. Gindensperger, C. Meier, J. A. Beswick, M.-C. Heitz**
Quantum-classical description of rotational diffractive scattering using Bohmian trajectories: Comparison with full quantum wave packet results
J. Chem. Phys. **116**, 10051-59 (2002).
- [J15] **E. Gindensperger, C. Meier, J. A. Beswick**
Quantum-classical dynamics including continuum states using quantum trajectories
J. Chem. Phys. **116**, 8-13 (2002).
- [J16] **S. V. Hoffmann, S. L. Lunt, N. C. Jones, D. Field, J. P. Ziesel**
An undulator based spherical grating monochromator beamline for low energy electron-molecule scattering experiments
Rev. Sci. Instr. **73**, 4157-63 (2002).
- [J17] **A. Le Padellec, G. F. Collins, H. Danared, A. Källberg, F. Hellberg, K. Andersson, D. Hanstorp, M. Larsson**
Relative cross sections for the Electron Impact Single Detachment on Li
J. Phys. B **35**, 3669-76 (2002).
- [J18] **D. Lemoine, J. G. Quattrucci, B. Jackson**
Efficient Eley-Rideal reactions of H atoms with single Cl adsorbates on Au(111)
Phys. Rev. Lett. **89**, 268302/1-4 (2002).
- [J19] **B. Lepetit, O. Roncero, A. Buchachenko, N. Halberstadt**
Electronic and vibrational predissociation in ArI₂ photodissociation dynamics
J. Chem. Phys. **116**, 8367-75 (2002).
- [J20] **B. Lepetit, D. Lemoine**
State resolved ArHBr photodissociation quantum dynamics
J. Chem. Phys. **117**, 8676-85 (2002).
- [J21] **G. Lévêque, C. Meier, R. Mathevet, C. Robilliard, J. Weiner, C. Girard, J.-C. Weeber**
Atomic diffraction from nanostructured optical potentials
Phys. Rev. A **65**, 053615-19 (2002).
- [J22] **G. Lévêque, C. Meier, R. Mathevet, B. Viaris de Lesegno, J. Weiner, C. Girard**
Designing experiments for the study of atom diffraction from nanostructured optical potentials
Euro. Phys. J. AP **20**, 219-26 (2002).

[J23] **G. Lévêque, G. Colas des Francs, C. Girard, J.-C. Weeber, C. Meier, R. Mathevet, C. Robilliard, J. Weiner**

Polarization state of the near optical field

Phys. Rev. E. **65**, 036701-1-8 (2002).

[J24] **M. Lezius, V. Blanchet, M. Y. Ivanov, A. Stolow**

Polyatomic molecules in strong laser fields: Nonadiabatic multielectron dynamics

J. Chem. Phys. **117**, 1575-88 (2002).

[J25] **R. Mathevet, R. Delhuille, C. Rizzo**

Computation of the phase induced by non-newtonian gravitational potentials in atom interferometry

Classical and Quantum Gravity **19**, L37-44 (2002).

[J26] **C. Meier, V. Engel**

Time-resolved photoelectron spectroscopy of molecular dissociation: Classical trajectory versus quantum wave-packet calculations

Phys. Chem. Chem. Phys. **4**, 5014-19 (2002).

[J27] **A. Miffre, R. Delhuille, B. Viaris de Lesegno, M. Büchner, C. Rizzo, J. Vigué**

The three-grating Mach-Zehnder optical interferometer: a tutorial approach using particle optics

European Journal of Physics **23**, 623-35 (2002).

[J28] **E. A. Naji, T. Nzeyimana, X. Urbain, A. Le Padellec**

Merged beam study of the associative ionisation $O^- + D^+ / O^+ + D^-$ and $C^+ + D^-$

J. Phys. B **35**, 4325-34 (2002).

[J29] **S. Nave, D. Lemoine**

Quantum mechanical studies of helium atoms scattering from isolated CO molecules on metal surfaces

J. Phys.: Condens. Matter **14**, 6263-80 (2002).

[J30] **C. Nicole, M. A. Bouchene, B. Girard**

Dynamics and Interference of fine-structure wave packets created by strong ultrashort pulses

Journal of Modern Optics **49**, 183-200 (2002).

[J31] **T. Nzeyimana, E. A. Naji, X. Urbain, A. Le Padellec**

Merged beam study of the associative ionisation (C^+ , N^+ and O^+) + O^-

Euro. Phys. J. D. **19**, 315-25 (2002).

[J32] **F. Olsson, M. Persson, N. Lorente, L. J. Lauhon, W. Ho**

Vibrational and Electronic Properties of acetylene, ethynyl and dicarbon chemisorbed on copper

J. Phys. Chem. B **106**, 8161-71 (2002).

[J33] **J. Ramirez Serrano, W. Degraffenreid, J. Weiner**

Polarization-Dependent Spectra in the Photoassociative Ionization of Cold Atoms in a Bright Sodium Beam

Phys. Rev. A **65**, 052719/1-8 (2002).

[J34] **D. Rayane, I. Compagnon, R. Antoine, M. Broyer, P. Dugourd, P. Labastie, J. M. L'Hermite, A. Le Padellec, G. Durand, F. Calvo, F. Spiegelman, A. R. Allouche**
Electric dipole moments and polarizabilities of single excess electron sodium fluoride clusters: Experiment and theory
J. Chem. Phys. **116**, 10730-38 (2002).

[J35] **X. Sha, B. Jackson, D. Lemoine**
Quantum studies of Eley-Rideal reactions between H atoms on a graphite surface
J. Chem. Phys. **116**, 7158-69 (2002).

[J36] **M. F. Somers, S. M. Kingma, E. Pijper, G. J. Kroes, D. Lemoine**
Six-dimensional quantum dynamics of scattering of ($v=0, j=0$) H_2 and D_2 from Cu(111): test of two LEPS potential energy surfaces
Chem. Phys. Lett. **360**, 390-99 (2002).

[J37] **S. Thiel, T. Klüner, D. Lemoine, H. J. Freund**
Rovibrational preexcitation in the photodesorption of CO from Cr_2O_3
Chem. Phys. **282**, 361-70 (2002).

[J38] **M. Wollenhaupt, A. Assion, D. Liese, C. Sarpe-Tudoran, T. Baumert, S. Zamith, M. A. Bouchene, B. Girard, A. Flettner, U. Weichmann, G. Gerber**
Interferences of ultrashort free electron wave packets
Phys. Rev. Lett. **89**, 173001/1-4 (2002).

[J39] **T. Zecho, A. Güttler, X. Sha, D. Lemoine, B. Jackson, J. Küppers**
Abstraction of D chemisorbed on graphite (0001) with gaseous H atoms
Chem. Phys. Lett. **366**, 188-95 (2002).

[J40] **R. Zemih, M. Boudjema, C. Bénazeth, Y. Boudouma, A. C. Chami**
Image potential effect on the specular reflection coefficient of alkali ions scattered from a nickel surface at low energy
NIM B **193**, 396-402 (2002).

2003

[J41] **A. Al Khalili, S. Rosen, H. Danared, A. M. Derkatch, A. Källberg, M. Larsson, A. Le Padellec, A. Neau, J. Semaniak, R. Thomas et al.**
Absolute High-Resolution Rate Coefficients for Dissociative Recombination of Electrons with HD^+ : Comparison of Results from Three Heavy Ion Storage Rings
Phys. Rev. A **68**, 042702/1-14 (2003).

[J42] **V. Blanchet, S. Boyé, S. Zamith, A. Campos, B. Girard, J. Lievin, D. Gauyacq**
(3 + 1)-resonantly enhanced multiphoton ionization-photoelectron spectroscopy of the (3d-4s) supercomplex of acetylene: The geometry of the E state revisited through experiment and theory
J. Chem. Phys. **119**, 3751-62 (2003).

[J43] **A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu**
An accurate test of calculated positions and lifetimes for $Ne^{6+}(1s^2 3lnl')^1L$ states ($n=3-5$) using a high resolution electron spectroscopy
NIM B **205**, 74-7 (2003).

- [J44] **A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu**
High-resolution electron spectroscopy of the $1s^2 3lnl'$ Be-like series in oxygen and neon. Test of theoretical data. I-Experimental method and theoretical background
J. Phys. B **36**, 47-64, corrigendum: *J. Phys. B*, **36**, 801 (2003).
- [J45] **A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu**
High-resolution electron spectroscopy of the $1s^2 3lnl'$ Be-like series in oxygen and neon. Test of theoretical data. II-Experimental results
J. Phys. B **36**, 65-92 (2003).
- [J46] **M. A. Bouchene**
Radial focusing of electron wave packets using linearly chirped intense pulses
Phys. Rev. A **68**, 023401/1-10 (2003).
- [J47] **A. Buchachenko, N. Halberstadt, B. Lepetit, O. Roncero**
Ar...I₂ : a model system for complex dynamics
Int. Rev. Phys. Chem. **22**, 153 (2003).
- [J48] **M. Büchner, R. Delhuille, C. Robilliard, J. Vigué, A. Miffre, C. Champenois**
Diffraction phases in atom interferometers
Phys. Rev. A **68**, 013607/1-4 (2003).
- [J49] **P. Cafarelli, M. Richard-Viard, C. Bénazeth, N. Nieuwjaer, N. Lorente**
Simulations of the azimuthal distribution of low energy H atoms scattered off Ag(110) at grazing incidence : DFT many-body versus model pair potentials
NIM B **203**, 211-17 (2003).
- [J50] **C. Cappelli, A. Rizzo, B. Mennucci, J. Tomasi, R. Cammi, G. L. J. A. Rikken, R. Mathevet, C. Rizzo**
The Cotton-Mouton effect of furan and its homologues in the gas phase, for pure liquids and in solution
J. Chem. Phys. **118**, 10712-24 (2003).
- [J51] **B. Chatel, J. Degert, S. Stock, B. Girard**
Competition between sequential and direct paths in a two-photon transition
Phys. Rev. A **68**, 041402R/1-4 (2003).
- [J52] **J. Degert, C. Meier, B. Chatel, B. Girard**
Coherent control of matter-wave interference in molecular predissociation
Phys. Rev. A **67**, 041402R/1-4 (2003).
- [J53] **J. C. Delagnes, V. Blanchet, M. A. Bouchene**
Role of the radiated field in the propagation of an ultra-short chirped pulse.
Optics Communications **227**, 125-31 (2003).
- [J54] **A. Dupays, B. Lepetit, J. A. Beswick, C. Rizzo, D. Bakalov**
Calculation of muon transfer from muonic hydrogen to atomic oxygen
Phys. Rev. A **67**, 062505/1-6 (2003).
- [J55] **A. Dupays, J. A. Beswick, B. Lepetit, C. Rizzo, D. Bakalov**
Hyperspherical elliptic coordinates treatment of muon transfer from muonic hydrogen to atomic oxygen
Phys. Rev. A **68**, 062506/1-5 (2003).

- [J56] **A. Dupays, J. A. Beswick, B. Lepetit, C. Rizzo, D. Bakalov**
Proton Zemach radius from measurement of the hyperfine splitting of hydrogen and muonic hydrogen
Phys. Rev. A **68**, 052503/1-5 (2003).
- [J57] **O. V. Elyukhina, O. S. Vasyuntinskii, J. A. Beswick**
Using ion imaging to analyze higher-order moments of the angular distribution of photofragments
Optics and Spectroscopy **94**, 369-373 (2003).
- [J58] **K. Fritioff, D. Hanstorp, J. Sandström, A. Ehlerding, M. Larsson, G. F. Collins, D. J. Pegg, H. Danared, A. Källberg, A. Le Padellec**
Electron-impact detachment of Cl
Phys. Rev. A **68**, 012712/1-8 (2003).
- [J59] **M.-C. Heitz, G. Durand, F. Spiegelman, C. Meier**
Theoretical study of the time-resolved photoelectron spectrum of Na₂F: effects of thermal initial conditions
Eur. Phys. J. D **24**, 181-4 (2003).
- [J60] **M.-C. Heitz, G. Durand, F. Spiegelman, C. Meier**
Time-resolved photoelectron spectra as probe of excited state dynamics: a full quantum study of the Na₂F cluster
J. Chem. Phys. **118**, 1282-91 (2003).
- [J61] **M. Jacquy, S. Bonhommeau, M. A. Bouchene**
Experimental demonstration of phase control of dispersion effect for an ultrashort pulse train propagating in a resonant medium
Opt. Lett. **28**, 1272-74 (2003).
- [J62] **G. Laurent, M. Tarisien, X. Fléchar, P. Jardin, L. Guillaume, P. Soboscinski, L. Adoui, A. Bordenave-Montesquieu, D. Bordenave-Montesquieu, J. Y. Chesnel, F. Frémont, D. Hennecart, E. Liénard, L. Maunoury, P. Moretto-Capelle, A. Cassimi**
Coincident Auger electron and recoil ion momentum spectroscopy for low-energy ion-atom collisions
NIM B **205**, 546-9 (2003).
- [J63] **D. Lemoine**
A note on orthogonal discrete Bessel representations
J. Chem. Phys. **118**, 6697-99 (2003).
- [J64] **N. Lorente, M.-F.-G. Hédouin, R.-E. Palmer, M. Persson**
Chemisorption of benzene and STM dehydrogenation products on Cu(100)
Phys. Rev. B **68**, 155401-1-9 (2003).
- [J65] **F. Megi, M. Belkacem, M. A. Bouchene, E. Suraud, G. Zwicknagel**
On the importance of damping phenomena in clusters irradiated by intense laser fields
J. Phys. B **36**, 273-82 (2003).
- [J66] **F. E. Olsson, N. Lorente, M. Persson**
STM images of molecularly and atomically chemisorbed oxygen on silver
Surf. Sci. **522**, L27-35 (2003).

[J67] **J. I. Pascual, N. Lorente, H. Song, H. Conrad, H.-P. Rust**
Selectivity in vibrationally mediated single-molecule chemistry
Nature **423**, 525-528 (2003).

[J68] **J. G. Quattrucci, B. Jackson, D. Lemoine**
Eley-Rideal reactions of H atoms with Cl adsorbed on Au(111): quantum and quasiclassical studies
J. Chem. Phys. **118**, 2357-66 (2003).

[J69] **T. P. Rakitzis, P. C. Samartzis, R. L. Toomes, T. N. Kitsopoulos, A. Brown, G. Balint-Kurti, O. S. Vasyuntinskii, J. A. Beswick**
Spin polarized hydrogen atoms from molecular photodissociation
Science **300**, 1936-38 (2003).

[J70] **A. Rentenier, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu, A. Bordenave-Montesquieu**
Kinetic energies of charged fragments resulting from multifragmentation and asymmetric fission of C₆₀ molecule in collisions with monocharged ions (2 to 130 keV)
J. Phys. B **36**, 1585-602 (2003).

[J71] **A. Rentenier, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu, A. Bordenave-Montesquieu**
Multifragmentation of C₆₀ induced by ⁴He²⁺ impact (E<60 keV/amu) and investigated by multicorrelation technique
NIM B **205**, 656-60 (2003).

[J72] **G. L. J. A. Rikken, C. Rizzo**
Magnetolectric anisotropy of the quantum vacuum, ,
Phys. Rev. A **67**, 015801/1-2 (2003).

[J73] **S. Zamith, V. Blanchet, B. Girard, J. Andersson, S. L. Sorensen, I. Hjelte, O. Björneholm, D. Gauyacq, N. Norin, J. Mauritson, A. L'Huillier**
The predissociation of highly excited states in acetylene by time-resolved photoelectron spectroscopy
J. Chem. Phys. **119**, 3763-73 (2003).

[J74] **J. P. Ziesel, N. C. Jones, D. Field, L. B. Madsen**
Reaction and scattering in cold electron collisions
Phys. Rev. Lett. **90**, 083201/ 1-4 ; erratum: **Phys. Rev. Lett.** **91**, 269904/1 (2003).

2004

[J75] **J. A. Beswick, A. G. Suits, O. Vasyutinskii, D. Zimmermann**
Possibility of a complete experiment in molecular dynamics
Adv. Chem. Phys. (Russie) **23**, 46-52 (2004).

[J76] **B. Chatel, J. Degert, B. Girard**
Role of quadratic and cubic spectral phases in ladder climbing with ultrashort pulses
Phys. Rev. A **70**, 053414/1-10 (2004).

[J77] **J. C. Delagnes, M. A. Bouchene**
Effect of a transient light-shift on the propagation of an ultrashort pulse in an atomic resonant atomic medium
Phys. Rev. A **69**, 063813/1-5 (2004).

[J78] **A. Dupays**

Isotopic effects in the muon transfer from $p\mu$ and $d\mu$ to heavier atoms

Phys. Rev. Lett. **93**, 043401/1-4 (2004).

[J79] **A. Dupays, B. Lepetit, J. A. Beswick, C. Rizzo, D. Bakalov**

Non-zero total angular momentum three-body dynamics using hyperspherical elliptic coordinates. Application to muon transfer from muonic hydrogen to atomic oxygen and neon

Phys. Rev. A **69**, 62501/1-8 (2004).

[J80] **G. Durand, M.-C. Heitz, F. Spiegelman, C. Meier, R. Mitric, V. Bonacic-Koutecky, J. Pittner**

Theoretical absorption spectra and conformational changes in ground and excited states of Na_3F

J. Chem. Phys. **121**, 9898-905 (2004).

[J81] **D. Field, N. C. Jones, J. P. Ziesel**

Cold electron scattering in SF_6 and C_6F_6 : bound and virtual state channels

Phys. Rev. A **69**, 052716/1-11 (2004).

[J82] **T. Frederiksen, M. Brandbyge, N. Lorente, A.-P. Jauho**

Inelastic scattering and local heating in atomic gold wires

Phys. Rev. Lett. **93**, 256601/1-4 (2004).

[J83] **K. Fritioff, J. Sandström, P. Andersson, D. Hanstorp, F. Hellberg, R. Thomas, W. Geppert, M. Larsson, F. Osterdahl, G. F. Collins *et al.***

Observation of an excited C_4^{2-} ion

J. Phys. B **37**, 2241-46 (2004).

[J84] **E. Gindensperger, C. Meier, J. A. Beswick**

Hybrid Quantum/Classical Dynamics Using Bohmian Trajectories

Adv. Quant. Chem. **47**, 331-46 (2004).

[J85] **M.-C. Heitz, G. Durand, F. Spiegelman, C. Meier, R. Mitric, V. Bonacic-Koutecky**

Ultrafast excited state dynamics of the Na_3F cluster: Quantum wave packet and classical trajectory calculations compared to experimental results

J. Chem. Phys. **121**, 9906-16 (2004).

[J86] **J. M. L'Hermite, V. Blanchet, A. Le Padellec, B. Lamory, P. Labastie**

Relaxation of photoexcited Na_3F

Eur. Phys. J. D **28**, 361-66 (2004).

[J87] **T. Lohmüller, V. Engel, J. A. Beswick, C. Meier**

Fractional Revivals in the ro-vibrational motion of I_2

J. Chem. Phys. **120**, 10442-49 (2004).

[J88] **N. Lorente**

Mode excitation induced by the scanning tunneling microscope

Appl. Phys. A **78**, 799-806 (2004).

[J89] **N. Lorente, J. I. Pascual**

Mode-specific strategy for controlling a single-molecule reaction

Phil. Trans. R. Soc. **362**, 1227 (2004).

[J90] **G. Martinet, S. Diaz-Tendero, M. Chabot, K. Wohrer, S. Della Negra, F. Mezdari, H. Hamrita, P. Désesquelles, A. Le Padellec, D. Gardès et al.**

Fragmentation of highly excited small neutral carbon clusters

Phys. Rev. Lett. **93**, 063401/1-4 (2004).

[J91] **C. Meier, J. A. Beswick**

Femtosecond pump-probe spectroscopy of I₂ in a dense rare gas environment: A mixed quantum/classical study of vibrational decoherence

J. Chem. Phys. **121**, 4550-58 (2004).

[J92] **C. Meier**

Mixed Quantum-classical treatment of vibrational decoherence

Phys. Rev. Lett. **93**, 173003/1-4 (2004).

[J93] **A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner, G. Tréneç, J. Vigué**

Anomalous cooling of the parallel velocity in seeded beams

Phys. Rev. A **70**, 030701R/1-4 (2004).

[J94] **A. Monmayrant, B. Chatel**

A new phase and amplitude high resolution pulse shaper

Rev. Sci. Instr. **75**, 2668-71 (2004).

[J95] **P. Moretto-Capelle, A. Rentenier, D. Bordenave-Montesquieu, A. Bordenave-Montesquieu**

Electron capture, ionization and fragmentation in collisions of singly charged ions with C₆₀

Physica Scripta T110, 325-31 (2004).

[J96] **B. D. Obreshkov, D. Bakalov, B. Lepetit, K. Szalewicz**

Collision quenching of antiprotonic helium atoms in gaseous helium

Phys. Rev. A **69**, 042701/1-6 (2004).

[J97] **C. O'Dwyer, G. Gay, B. Viaris de Lesegno, J. Weiner**

The nature of alkanethiol self-assembled monolayer adsorption on sputtered gold substrates

Langmuir **20**, 8172-82 (2004).

[J98] **F. Olsson, A.-G. Borisov, M. Persson, N. Lorente, A. Kasansky, J. P. Gauyacq**

Decay and dephasing of the Cu(100) image states induced by Cu adatoms

Phys. Rev. B **70**, 205417-1-5 (2004).

[J99] **R. Quidant, G. Lévêque, J.-C. Weeber, A. Dereux, C. Girard, J. Weiner**

Addressing and imaging microring resonators with optical evanescent light

Phys. Rev. B **69**, 081402-1-4 (2004).

[J100] **R. Quidant, G. Lévêque, J.-C. Weeber, A. Dereux, C. Girard, J. Weiner**

Frustrated energy transport through micro-waveguides decorated by gold nanoparticle chains

Europhys. Lett. **66**, 785-91 (2004).

[J101] **R. Quidant, G. Lévêque, J.-C. Weeber, A. Dereux, G. Colas des Francs, C. Girard, J. Weiner**

Modelling resonant coupling between microring resonators addressed by optical evanescent waves

Nanotechnology **15**, 1200-10 (2004).

- [J102] **J. Ramirez Serrano, W. De Graffenreid, E. Tiesinga, P. S. Julienne, J. Weiner**
Beam-loss spectroscopy of Cold Collisions in a Bright Sodium Beam
Phys. Rev. A **69**, 042708/1-8 (2004).
- [J103] **A. Rentenier, A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu**
Asymmetric fission and evaporation of C_{60}^{q+} ($q=2-4$) fullerene ions in collisions with protons. I- Proton results
J. Phys. B **37**, 2429-54 (2004).
- [J104] **A. Rentenier, A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle, B. Bordenave-Montesquieu**
Asymmetric fission and evaporation of C_{60}^{q+} ($q=2-4$) fullerene ions in ion - C_{60} collisions. II- Dependence on collisional processes.
J. Phys. B **37**, 2455-65 (2004).
- [J105] **K. Rubin, M. Eminyan, F. Perales, R. Mathevet, K. Brodsky, B. Viaris de Lesegno, J. Reinhardt, M. Boustimi, J. Baudon, J. C. Karam, J. Robert**
Atom interferometer using two Stern-Gerlach magnets
Las-Phys-Lett. **1(4)**, 184-93 (2004).
- [J106] **M. F. Somers, D. Lemoine, G. J. Kroes**
Performance and application of a symmetry adapted pseudo spectral method for scattering of a diatomic molecule from a square surface: $H_2+Cu(111)$
Chem. Phys. **304**, 59-77 (2004).
- [J107] **E. M. Staicu-Casagrande, T. Nzeyimana, E. A. Naji, N. de Ruelle, B. Fabre, A. Le Padellec, X. Urbain**
Abstraction and insertion mechanisms in reactive collisions between H_2^+ or D_2^+ and O^-
Eur. Phys. J. D **31**, 469-75 (2004).
- [J108] **N. Vitanov, B. Girard**
Adiabatic excitation of rotational ladder by chirped laser pulses
Phys. Rev. A **69**, 033409/1-13 (2004).
- [J109] **W. Wohlleben, J. Degert, A. Monmayrant, B. Chatel, M. Motzkus, B. Girard**
Coherent transients as a highly sensitive probe for femtosecond pulse shaper
Appl. Phys. B **79**, 435-39 (2004).
- 2005**
- [J110] **D. Bakalov, J. A. Beswick, A. Dupays, C. Rizzo**
Proton Zemach radius and the hyperfine splitting of the ground state of muonic hydrogen
Can. J. Phys. **83**, 351-356 (2005).
- [J111] **F. Bielsa, R. Battesti, C. Robilliard, G. Bialolenker, G. Bailly, G. Tréneç, A. Rizzo, C. Rizzo** *Kerr effect of molecular oxygen at $\lambda = 1064$ nm : experiment and theory*
Eur. Phys. J. D, DOI : 10.1140/epjd/e2005-00243-1. (2005).
- [J112] **A. Bordenave-Montesquieu, D. Bordenave-Montesquieu, A. Rentenier, P. Moretto-Capelle**
Asymmetric fission and evaporation of C_{60}^{q+} ($q=2-4$) fullerene ions in ion - C_{60} collisions. III- Universal collisional behaviour for fission
J. Phys. B **38**, 1037-49 (2005).

[J113] **F. Calvo, P. Labastie**

Computer simulation of the shape and "phase transitions" in finite systems
Eur. Phys. J. D **28**, S23-30 (2005).

[J114] **A. Dupays, C. Robilliard, C. Rizzo, G.F. Bignani**

Observing Quantum Vacuum Lensing in a Neutron Star Binary System
Phys. Rev. Lett. **94**, 161101/1-4 (2005).

[J115] **S. Gräfe, C. Meier, V. Engel**

Instantaneous dynamics and quantum control fields: principle and numerical applications
J. Chem. Phys. **122**, 184103-1-8 (2005).

[J116] **A. Hidouche, A. C. Chami, Y. Boudouma, M. Boudjema, C. Bénazeth**

Specular reflection model study of the image effect in He $+a$:Si scattering at low energy
NIM B **230**, 178-184 (2005).

[J117] **N. C. Jones, D. Field, J. P. Ziesel, T. A. Field**

Virtual state scattering with cold electrons: para-xylene and para-difluorobenzene
J. Chem. Phys. **122**, 074301-1-8 (2005).

[J118] **A. Le Padellec**

Partial near threshold cross sections for the Associative Ionization to form CO⁺, NO⁺ and O₂⁺
Phys. Scripta **71**, 621-26 (2005).

[J119] **G. Lévêque, R. Mathevet,**

Blazed atom grating,
J. Opt. Soc. Am. B **22**, 1554-1560 (2005)

[J120] **N. Lorente, H. Ueba**

CO dynamics induced by tunnelling electrons: differences on Cu(110) and Ag(110)
Eur. Phys. J. D **35**, 341-48 (2005).

[J121] **N. Lorente, R. Rurali, H. Tang**

Single-molecule manipulation and chemistry with the STM
J. Phys.: Condens. Matter **17**, S1049-74 (2005).

[J122] **C. Meier, M.-C. Heitz**

Laser control of vibrational excitation in carboxy-hemoglobin: a quantum wave packet study
J. Chem. Phys. **123**, 044504-1-11 (2005).

[J123] **F. Mezdari, K. Wohrer, M. Chabot, G. Martinet, S. Della Negra, P. Désesquelles, A. Le Padellec**

Ionisation cross sections of small cationic carbon clusters in high energy collisions with helium atoms and stability of multiply charged species
Phys. Rev. A **72**, 032707/1-7 (2005).

[J124] **A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner, G. Tréneç, J. Vigué**

Lithium atom interferometer using laser diffraction: description and experiments
Eur. Phys. J. D **33**, 99-112 (2005).

[J125] **A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner, G. Tréneç, J. Vigué**

Parallel temperatures in supersonic beams: Ultracooling of light atoms seeded in a heavier carrier gas
J. Chem. Phys. **122**, 094308-1-10 (2005).

[J126] **A. Monmayrant, A. Arbouet, B. Girard, B. Chatel, B. J. Whitaker, A. Barman, D. Kaplan**

Optimisation of NOPA output pulse shaping using an AOPDF with dispersion self-correction
Appl. Phys. B **81**, 177-180 (2005).

[J127] **M. Mützel, M. Müller, D. Haubrich, D. Meschede, C. O'Dwyer, G. Gay, B. Viaris de Lesegno, G. Ludolph, G. Georgiev, E. Osterschulze, J. Weiner**

The Atom Pencil : Serial Writing in the Sub-Micrometer Domain
Appl. Phys. B **80**, 941-944 (2005).

[J128] **S. Nave, D. Lemoine, M. F. Somers, S. M. Kingma, G. J. Kroes**

Six-dimensional quantum dynamics of scattering of ($v=0, j=0$) D_2 and of ($v=1, j=0$) H_2 from $Cu(111)$

J. Chem. Phys. **122**, 214709-1-9 (2005).

[J129] **N. Nieuwjaer, C. Bénazeth, P. Benoit-Cattin, P. Cafarelli, M. Richard-Viard**

Charge transfer in grazing scattering on clean and oxygen covered $Cu(1\ 1\ 0)$ surfaces: velocity effects

NIM B **230**, 317-322 (2005).

[J130] **C. O'Dwyer, G. Gay, B. Viaris de Lesegno, J. Weiner, A. Camposeo, F. Tantussi, F. Fuso, M. Allegrini, E. Arimondo**

Atomic nanolithography patterning of submicron features: writing an organic self-assembled monolayer with cold, bright Cs atom beams

Nanotechnology **16**, 1536-41 (2005).

[J131] **C. O'Dwyer, G. Gay, B. Viaris de Lesegno, J. Weiner, K. Ludolph, D. Albert, E. Osterschulze**

Writing self-assembled monolayers with Cs: optimization of atomic nanolithography imaging using self-assembled monolayers on gold substrates

J. Appl. Phys. **97**, 114309/1-11 (2005).

[J132] **C. Rizzo, G. L. J. A. Rikken**

Magneto-Electro-Optical properties of the Quantum Vacuum and Lorentz Invariance
Physica Scripta **71**, C5-8 (2005).

[J133] **O. Roncero, A. Buchachenko, B. Lepetit**

Competition between adiabatic and non adiabatic fragmentation pathways in the unimolecular decay of $ArI_2(B)$ van der Waals complex

J. Chem. Phys. **122** 034303-1-12 (2005).

[J134] **R. Rurali, N. Lorente**

Metallic and semimetallic Silicon $\langle 110 \rangle$ nanowires

Phys. Rev. Lett. **94**, 026805/1-4 (2005).

[J135] **R. Rurali, N. Lorente**

On the properties of surface reconstructed silicon nanowires

Nanotechnology **16**, S250 -3 (2005).

[J136] **T. Schlathölter, R. Hoekstra, S. Zamith, Y. Ni, H. G. Muller, M. J. J. Vrakking**

Response of polyatomic molecules to ultrastrong laser- and ion-induced fields

Phys. Rev. Lett. **94**, 23300/1-4 (2005).

- [J137] **X. Sha, B. Jackson, D. Lemoine, B. Lepetit**
Quantum studies of H atom trapping on a graphite surface
J. Chem. Phys. **122**, 014709-1-8 (2005).
- [J138] **H. Ueba, T. Mii, N. Lorente, B. N. J. Persson**
Adsorbate motions induced by inelastic-tunneling current: theoretical scenarios of two-electron processes
J. Chem. Phys. **123**, 084707/1-8 (2005).
- [J139] **S. Zamith, Z. Ansari, F. Lepine, M. J. J. Vrakking**
Single-shot measurement of revival structures in femtosecond laser-induced alignment of molecules
Opt. Lett. **30**, 2326-28 (2005).
- [J140] **J. P. Ziesel, L. B. Madsen, N. C. Jones, D. Field**
Electron attachment cross-sections in CCl₄ and SF₆ from total scattering data
J. Chem. Phys. **122**, 024309 (2005).
- [J141] **A. Dupays, C. Rizzo, M. Roncadelli, G. F. Bignami**
Looking for Light Pseudoscalar Bosons in Gamma-Rays from Binary Pulsars
Phys. Rev. Lett. (accepté)
- [J142] **G. Gay, B. Viaris de Lesegno, R. Mathevet, C. O'Dwyer, J. Weiner**
Atomic fluorescence mapping of spatial optical intensity distributions issuing from nanostructured slits, milled into subwavelength metallic layers
Appl. Phys. B (accepté).
- [J143] **A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner, G. Tréneç and J. Vigué**
Atom interferometry measurement of the electric polarizability of lithium
Eur. Phys. J. D. (accepté)
- [J144] **A. Monmayrant, B. Chatel, B. Girard**
Femtosecond pulse shape reconstruction from coherent transient measurements
Opt. Lett. (accepté).
- [J145] **A. Arbouet, B. Girard, B. Chatel, R. Freydier, F. Poitrasson, B. Dupré, F. Candaudap**
Effect of pulse duration on chemical analysis of glass with LA-ICP-MS
Applied Physics A-Materials Science & Processing (soumis)
- [J146] **J. C. Delagnes, A. Monmayrant, P. Zahariev, A. Arbouet, B. Chatel, B. Girard, M. A. Bouchene**
Compensation of resonant dispersion in atomic medium using a pulse shaper
Appl. Phys. B (soumis).
- [J147] **H. Katsuki, H. Chiba, B. Girard, C. Meier, K. Ohmori**
Observing picometric quantum interference structures at the half revival time
Phys. Rev. Lett. (soumis).
- [J148] **W. Merkel, M. Bienert, O. Crasser, F. Haug, E. Lutz, H. Mack, M. Freyberger, W. P. Schleich, I. S. Averbukh, B. Girard, H. Maier, G. G. Paulus**
Chirped pulses, Gauss sums and the factorization of numbers
International Journal of Modern Physics B (soumis).

[J149] **A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner, G. Tréneç, J. Vigué**
Measurement of the electric polarizability of lithium by atom interferometry
Phys. Rev. Lett. (soumis)

[J150] **A. Monmayrant, B. Chatel, B. Girard**
Atomic spirograph: measurement of the excited state wave function using coherent transients
Phys. Rev. Lett. (soumis).

11.2. Conférences Invitées

11.2.1. dans les congrès internationaux

2002

[I1] **J. Degert*, S. Stock, B. Girard, B. Chatel, W. Wohlleben, M. Motzkus**
Manipulation of Coherent Transients with shaped ultrashort pulses
 COCOMO network meeting, Sofia (Bulgarie), 5-6 apr 2002, (2002).

[I2] **R. Delhulle, A. Miffre, L. Jozefowski, B. Viaris de Lesegno, M. Büchner, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué***
First experiments with a Mach-Zehnder atom interferometer
 Colloque PAAT, Cracovie, 31/05-02/06/2002, (2002).

[I3] **B. Girard*, B. Chatel, J. Degert, C. Meier**
Coherent Control in Atoms and Molecules : Application to information storage ?
 Quantware, Toulouse, Juillet 2002, (2002).

[I4] **N. Lorente**
Total energy methods in Computational Condensed Matter
 Psik 2000 workshop, La Laguna, Tenerife, Spain., Janvier 2002 (2002).

[I5] **C. Meier**
Mixing quantum ad classical mechanics: The MQCB method and its applications
 CECAM-workshop: Currents, trajectories and their applications in Quantum dynamics Lyon, septembre 2002 (2002).

[I6] **C. Meier**
Mixing quantum and classical mechanics using Bohmian trajectories
 ITAMP workshop on Computational Approaches to Time-Dependent Quantum Dynamics, Harvard mai 2002, (2002).

[I7] **P. Moretto-Capelle*, D. Bordenave-Montesquieu, A. Rentenier, A. Bordenave-Montesquieu**
Multi-fragmentation of C60 induced by low charged ions
 3rd Annual LEIF Meeting, Igls/Innsbruck, Autriche (2002).

[I8] **J. Weiner**
Cool Interactions 2002, Workshop and Training School Interactions in Ultracold Gases from Atoms to Molecules, Internationales Wissenschaftsforum, Heidelberg 9-13 septembre 2002 (2002).

[I9] **J. Weiner**

International Conference on "Current Developments in Atomic, Molecular and Chemical Physics with applications", Delhi University, Delhi, India, 20-22 March 2002, (2002).

2003

[I10] **J. A. Beswick**

Non adiabatic transitions in muon transfer collisions, Spectroscopy and dynamics on multiple surfaces

Telluride, USA, août 2003, (2003).

[I11] **A. Bordenave-Montesquieu*, P. Moretto-Capelle, A. Rentenier, D. Bordenave-Montesquieu**

Electron spectroscopy and fragmentation of C60 in collisions with monocharged ions

4th Annual LEIF Meeting,, Belfast, Irlande, (2003).

[I12] **B. Chatel*, J. Degert, A. Monmayrant, J.-C. Delagnes, S. Stock, P. Zahariev, B. Girard, M. A. Bouchene**

Coherent Control in Atoms with ultrashort chirped and shaped laser pulses

COCOMO network meeting, Heraklion (Crète), 9-10 oct 2003, (2003).

[I13] **B. Girard*, B. Chatel, A. Monmayrant, M. A. Bouchene, J.-C. Delagnes**

Coherent Control in Atoms with ultrashort chirped and shaped laser pulses

Quebec International Symposium on Ultrafast Laser Science 2: interaction and propagation, Quebec City, 27-29 sept 2003, (2003).

[I14] **B. Girard*, B. Chatel, A. Monmayrant, M. A. Bouchene, J.-C. Delagnes**

Coherent Control in Atoms with ultrashort chirped and shaped laser pulses

Optimal control of Quantum dynamics: Theory and experiment, Ringberg Castle (Allemagne), 7-10 dec 2003, (2003).

[I15] **B. Girard*, J. Degert, S. Stock, B. Chatel, W. Wohlleben, M. Motzkus**

Coherent Control in Atoms and Molecules with ultrashort chirped and shaped laser pulses

FRISNO 7, Les Houches, 17-20 feb 2003, (2003).

[I16] **B. Girard*, J. Degert, S. Zamith, S. Stock, B. Chatel, M. A. Bouchene, V. Blanchet, W. Wohlleben, M. Motzkus**

Coherent Control in Atoms and Molecules with ultrashort chirped and shaped laser pulses

Analysis and control of ultrafast photoinduced reactions, Berlin, 20-22 march 2003, (2003).

[I17] **B. Girard*, J. Degert, S. Zamith, S. Stock, B. Chatel, M. A. Bouchene, V. Blanchet, W. Wohlleben, M. Motzkus**

Coherent Control in Atoms and Molecules with ultrashort chirped and shaped laser pulses

Manipulation of electrons, atoms and molecules (IOP symposium), Nottingham, 8th april 2003, (2003).

[I18] **P. Labastie**

Phase Transitions in Free Clusters

Condensed Matter Theory, Toulouse, France, sep. 15-20 2003, (2003).

[I19] **N. Lorente**

Mode excitation and reaction pathways induced by the scanning tunneling microscope
13th International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms, Prague, Czech Republic, 30 juillet–2 août 2003, (2003).

[I20] **N. Lorente**

Mode excitation and reaction pathways induced by the scanning tunneling microscope
CECAM-ESF/Psi-k Workshop on Electronic Transport in Molecular Systems CECAM, Lyon, France, 2-5 Juin 2003, (2003).

[I21] **N. Lorente**

Mode excitation and reaction pathways induced by the scanning tunneling microscope
Hauptvortrag dans la réunion de printemps de la société allemande de physique, DPG, Dresden, Allemagne, 24-28 mars 2003, (2003).

[I22] **N. Lorente**

Mode selective chemistry induced by tunneling electrons
Condensed Matter Theory conference, Toulouse, 22–26 septembre 2003, (2003).

[I23] **N. Lorente**

Processus inélastiques induits par le microscope à effet tunnel : spectroscopie vibrationnelle et réactivité contrôlée
Académie de Sciences de l'Institut de France et Académie des Sciences de la Société Royale du Canada, Colloque conjoint Molécules et Nanoscience, La Grande Motte, France, 6-9 avril 2003, (2003).

[I24] **N. Lorente**

Scanning tunneling microscope theory: elastic and inelastic currents
Winter school on scanning probe microscopy and spectroscopy, Delmenhorst, Allemagne, 4-7 février 2003, (2003).

[I25] **C. Meier**

Mixing quantum and classical mechanics: The MQCB method and its applications
International Summer school on electron transport in nanostructures, Toulouse, mai 2003, (2003).

[I26] **A. Miffre, R. Delhuille, M. Büchner, C. Robilliard, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué***

Atom interferometry on a thermal lithium beam
Symposium "Cold atoms and quantum information" Collège de France, 7 février 2003, (2003).

[I27] **P. Moretto-Capelle*, A. Rentenier, D. Bordenave-Montesquieu, A. Bordenave-Montesquieu**

Electron capture, ionization and fragmentation in collisions of singly-charged ions with C60
23th ICPEAC Stockholm, Suede, (2003).

[I28] **J. Weiner**

Advanced School on Time and Frequency Metrology,, São Paulo, Brazil, 5-15 octobre 2003, (2003).

[I29] **W. Wohlleben*, J. Degert, B. Chatel, B. Girard**

A time domain Fresnel lens with coherent control
Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG), Hannover, Germany, (2003).

[I30] **J. P. Ziesel***, **D. Field**, **N. C. Jones**, **S. V. Hoffmann**, **S. L. Lunt**, **T. A. Field**, **N. J. Mason**

Total scattering of cold electrons by molecules

EMS-03 (International Symposium on Low Energy Electron-Molecule Collisions and Swarms), Colloque satellite du XXIII ICPEAC, Prague, (2003).

2004

[I31] **V. Blanchet**

Time resolved dynamics in polyatomic molecules with VUV pulses

Needs and Opportunity for Future Advanced Light Sources-Euresco Conference, Propriano, (2004).

[I32] **V. Blanchet**

Time resolved dynamics in polyatomic molecules with VUV pulses

ACS's 227th National Meeting, Anaheim, USA, (2004).

[I33] **B. Chatel**

Non linear mixing and shaping from NIR to UV : Towards the control of molecular dynamics

PICNIC network meeting, Paris, (2004).

[I34] **J. A. Davis***, **J. J. Wathen**, **V. Blanchet**, **R. T. Phillips**

Time-resolved degenerate four-wave mixing (TR-DFWM) of magneto-excitons in GaAs/AlGaAs single quantum wells (SQW)

The 20th General Conference of the Condensed Matter Division European Physical Society, Prague, (2004).

[I35] **B. Girard***, **B. Chatel**, **A. Monmayrant**

Coherent control in atoms and molecules with ultrashort laser pulses

Symposium on Control of Molecules and Clusters in Intense Laser Fields, Tokyo University, July 26, 2004, (2004).

[I36] **B. Girard***, **B. Chatel**, **A. Monmayrant**

Coherent control in atoms and molecules with ultrashort laser pulses

Physical Chemistry Colloquium on Ultrafast and Intense Field Phenomena, Tohoku University, Sendai, August 2-3, 2004, (2004).

[I37] **B. Girard***, **B. Chatel**, **A. Monmayrant**

Coherent control with shaped ultrashort laser pulses in atoms and molecules

"Frontiers of Nonlinear Physics", Nizhny Novgorod, Russia, July 5-12, 2004, (2004).

[I38] **D. Lemoine**

Theoretical dynamics of recombinative collisions of gas phase atoms with atoms adsorbed on surfaces

European Conference "Atomic and Molecular Physics" ECAMP VIII, Rennes, 6 au 10 Juillet 2004, (2004).

[I39] **N. Lorente**

Inducing controlled atomic dynamics by an electron current

Workshop on Surface and Nano Science ISSP, Tokyo, Japan, 2-4 august 2004, (2004).

[I40] **N. Lorente**

Inducing controlled atomic dynamics by an electron current.

Workshop on Molecule-surface interactions, San Sebastian, Espagne, 8–11 septembre 2004 (2004).

[I41] **C. Meier**

Femtosecond Wave packet dynamics and vibrational decoherence: a mixed quantum-classical study of I₂ in a dense rare gas environment

Réunion du SFB : « Analysis and Control of Ultrafast Photoinduced processes", Berlin, Allemagne, Octobre 2004, (2004).

[I42] **P. Moretto-Capelle*, A. Rentenier, A. Bordenave-Montesquieu, D. Bordenave-Montesquieu**

Secondary electron emission in proton-uracil collision : preliminary results

Radiation damage in biomolecular systems, Lyon, France, (2004).

[I43] **S. Stock, B. Chatel*, B. Girard**

Coherent Control in Atoms with ultrashort laser pulses and application to Polychromatic Laser Guided Star

Workshop on Polychromatic Laser Guided Star, Ste-Croix (Ain), 3-4 juin 2004, (2004).

[I44] **J. Weiner**

Workshop on Mixtures of Ultracold Atoms, satellite of ICAP XIX, International Conference on Atomic Physics,, São Pedro, Brazil, 19-23 juillet 2004, (2004).

[I45] **J. Weiner**

NFO-8, Eighth International Conference on Near-field Nano Optics and Related Techniques, Séoul, Corée, 5-9 septembre 2004, (2004).

[I46] **J. Weiner**

LAM-7, Seventh International Workshop on Physics and Modern Applications of Lasers, Douala, Cameroon, 6-10 décembre 2004, (2004).

2005

[I47] **J. A. Beswick**

Polarization of photofragments' fluorescence: the semiclassical treatment.

CCP6 on Vector correlation and alignment in chemistry, Bristol,, 20-23 juillet 2005, (2005).

[I48] **B. Chatel*, A. Monmayrant, B. Girard**

The atomic spirograph: atomic wave function and laser pulse shape measurements from coherent transients

ICOLS, Aviemore, United Kingdom, June 20-24, 2005, (2005).

[I49] **B. Chatel*, A. Monmayrant, B. Girard**

Control of Coherent Transients using shaped pulses

CLEO (EQEC) Europe, Munich, June 13-16, 2005, (2005).

[I50] **J. A. Davis*, V. Blanchet, J. J. Wathen, R. T. Phillips, A. I. Tartakovskii, M. S. Skolnick**

Time resolved of Spin coherence of excitons in a GaAs/AlGaAs quantum dots

OECS, Southampton, (2005).

- [I51] **D. Field, N. C. Jones, L. B. Madsen, J. P. Ziesel, T. A. Field**
Cold association of electrons and molecules
PARYS workshop (Ultracold Plasmas and Rydberg Systems), Gif-sur-Yvette, (2005).
- [I52] **D. Field, N. C. Jones, J. P. Ziesel**
Cold electrons in plasmas and molecular interactions
SAPP XV (15th Symposium of Plasma Processes), Podbanské, Slovaquie, (2005).
- [I53] **D. Lemoine**
Resonance states in the chemisorption of hydrogen atoms on the graphite (0001) surface
13th Workshop “Quantum Atomic and Molecular Tunneling in Solids and other Condensed Phases” QAMTS, Saint Jacques de Compostelle, Espagne, 27 au 31 Juillet 2005, (2005).
- [I54] **B. Lepetit**
Hyperspherical approach to charge transfer and reaction dynamics
Dresde, novembre 2005, (2005).
- [I55] **B. Lepetit**
Muon transfer between hydrogen and heavier atoms
QED, Quantum Vacuum and the search for New Forces,, Les Houches, 5-9 juin 2005, (2005).
- [I56] **N. Lorente**
Total-energy calculations as the basis of electronic transport calculations: the need of self-consistent electron-vibration couplings
CECAM; Workshop on State of the art developments and perspectives of real-space electronic structure techniques in condensed matter and molecular physics, Lyon, 20 – 24 juin 2005, (2005).
- [I57] **C. Meier**
Hybrid quantum/classical dynamics using quantum trajectories
Workshop on: « Molecular dynamics : Chemistry and Mathematics » of the DFG
Schwerpunktprogramm: « Multiscale problems », Blaubeuren, Allemagne, juin 2005, (2005).
- [I58] **C. Meier**
A mixed quantum-classical study of vibrational decoherence
Quantum dynamics of complex molecular systems University of Florida Research Center,
Paris, mai 2005, (2005).
- [I59] **A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner*, G. Tréneç, J. Vigué**
Interférométrie atomique avec le lithium aux énergies thermiques
Congrès Général de la Société Française de Physique et de Belgian Physical Society, Lille, 29
Août-2 Septembre 2005, (2005).
- [I60] **C. Rizzo**
Probing Dark Matter and vacuum Energy by light Propagation in a Magnetic Field
Astroparticle Meeting: dark energies, Dark matters, IHP, Paris, 28-29 Avril 2005, (2005).
- [I61] **C. Robilliard**
The BMV project : status of the experiment
QED2005, Les Houches, France, (2005).

[I62] **J. Weiner**

FRISNO-8, French-Israeli Symposium on Nonlinear and Quantum Optics, Ein Bokek, Israel, février 20-27 2005, (2005).

[I63] **J. Weiner**

CAMS-1, Conference on Atoms and Molecules near Surfaces, Heidelberg, Germany, 4-8 avril 2005, (2005).

11.3.2. dans les congrès nationaux

2002

[I64] **V. Blanchet**

Dynamiques ultrarapides étudiées par spectroscopie de photoélectrons résolue en temps
Colloque PAMO/JSM, Bourges, juillet 2002, (2002).

[I65] **V. Blanchet*, B. Girard, et al**

Dynamique femtoseconde dans les Molécules et agrégats par excitation VUV
Journée Harmoniques VUV, Orsay, mars 2002, (2002).

[I66] **J. Degert, S. Stock*, B. Girard, B. Chatel**

Interferences in Quantum Ladder Climbing and Laser Guided Artificial Star
Ecole d'été sur le contrôle cohérent, Cargèse, (2002).

[I67] **R. Delhuille, A. Miffre, L. Jozefowski, B. Viaris de Lesegno, M. Büchner, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué**

Current Developments in Atomic, Molecular and Chemical Physics with applications
Colloque PAMO, Bourges, juillet 2002, (2002).

[I68] **R. Delhuille*, A. Miffre, L. Jozefowski, B. Viaris de Lesegno, M. Büchner, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué**

Interférométrie atomique avec l'atome de lithium
Colloque PAMO 2002, Bourges, juillet 2002, (2002).

[I69] **B. Girard*, S. Zamith, J. Degert, S. Stock, V. Blanchet, B. Chatel, M. A. Bouchene**
Coherent Control in Atomic and Molecular Systems

Atomes, Molécules et Lumière – Colloque en l'honneur de Raymond Vetter, Gif sur Yvette, 12-13 nov 2002, (2002).

[I70] **C. Meier**

Dynamique femtoseconde et décohérence vibrationnelle de I2 dans un gaz rare à haute pression

8ème Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones, Strasbourg, septembre 2002, (2002).

[I71] **C. Meier**

Dynamique femtoseconde et décohérence vibrationnelle de I2 dans un gaz rare à haute pression

8ème Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones, Strasbourg, septembre 2002, (2002).

[I72] **C. Meier**

Mécanismes de décohérence quantique: I2 dans un gaz rare à haute pression
GDR Femtochimie en Solution, Pont-à-Mousson, décembre 2002 (2002).

[I73] **C. Meier**
Une nouvelle méthode mixte quantique/classique
PAMO, Bourges, juillet 2002, (2002).

2003

[I74] **M. A. Bouchene**
Propagation d'impulsions femtosecondes dans un milieu optiquement dense : observation et contrôle
Coloq 8, Toulouse, Septembre 2003, (2003).

[I75] **B. Chatel*, J. Degert, A. Monmayrant, J. C. Delagnes, S. Stock, P. Zahariev, B. Girard, M. A. Bouchene**
Mise en forme et boucle ouverte: un mariage heureux
6^{èmes} Journées de Phénomènes Ultrarapides, Strasbourg, 3-5 septembre, (2003).

[I76] **N. Lorente**
Processus inélastiques induits par le microscope à effet tunnel : spectroscopie vibrationnelle et réactivité contrôlée
Atelier de printemps "Physique des Surface et Nanostructures", Cargèse, 25-30 mai 2003, (2003).

[I77] **C. Meier**
Dynamique ultrarapide de petits agrégats de fluorure de sodium excités par des impulsions femtosecondes
JPU, Mittelwihr, Octobre 2003, (2003).

2004

[I78] **V. Blanchet**
Time resolved dynamics in polyatomic molecules with VUV pulses
Applications des sources accordables VUV-X fs combinant accélérateurs et lasers :slicing sur SOLEIL et la proposition ARC-EN-CIEL, Orsay, (2004).

[I79] **B. Chatel**
Sources ultra-courtes accordables : État de l'art
FEMTO 2004, Porquerolles, (2004).

[I80] **B. Girard*, S. Stock, S. Zamith, J. Degert, A. Monmayrant, J. C. Delagnes, B. Chatel, V. Blanchet, M. A. Bouchene**
Contrôle cohérent avec des impulsions laser ultracourtes mises en forme
Symposium « Manipulations d'atomes et de photons », dédié à J. Brosnel, Collège de France, Paris, 16 janvier 2004, (2004).

[I81] **B. Girard**
Le contrôle cohérent
FEMTO2004, Ile de Porquerolles, 21-24 Sept. 2004, (2004).

[I82] **D. Lemoine**

Notions sur les approches de paquet d'ondes quantiques

2nde journée des théoriciens de la Fédération LUMAT., Orsay, 8 Mars 2004, (2004).

[I83] **A. Miffre, M. Jacquey, M. Büchner, G. Tréneç, J. Vigué***

Atom interferometry

ECAMP/PAMO, Rennes, Juillet 2004, (2004).

[I84] **A. Miffre, M. Jacquey, M. Büchner, G. Tréneç, J. Vigué***

Interférences atomiques de contraste élevé avec le lithium aux énergies thermiques

Journées du GREX 2004, Nice, 27-29 Octobre 2004, (2004).

[I85] **C. Rizzo**

La biréfringence magnétique du vide : théorie et expérience

COLOQ8, Toulouse, Septembre 2004, (2004).

2005

[I86] **D. Lemoine**

Dynamique quantique des interactions hydrogène-surface

Colloque interdisciplinaire "Interaction de l'hydrogène avec des surfaces", Observatoire de Paris, 13 et 14 Juin 2005, (2005).

[I87] **C. Meier**

Contrôle quantique par la dynamique quantique instantanée : principes et applications

Journée thématique : "Contrôle et dynamique sous champs laser", Paris, mars 2005, (2005).

[I88] **C. Meier**

Spectroscopie femtoseconde

GDR « Agrégation, Fragmentation et Thermodynamique des Systèmes complexes », Porquerolles, mai 2005, (2005).

[I89] **A. Miffre, M. Jacquey, M. Büchner, G. Tréneç, J. Vigué***

Interférométrie atomique avec le lithium

COLOQ9, Dijon, 7-9 Septembre 2005, (2005).

11.3. Les communications avec actes

2002

[P1] **S. Askenazy, J. Billette, P. Dupré, P. Ganau, J. Mackowski, J. Marquez, L. Pinard, O. Portugall, D. Ricard, G. Rikken, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué**

Mesure de la biréfringence magnétique du vide : le projet BMV

COLOQ 7 (Rennes, 2001), A. Aspect, M. Brunel, and O. Emile ed., **J. Phys. IV France**, Vol. 12, pp. Pr5-145-46 (2002).

[P2] **J. Degert, C. Meier, B. de Beauvoir, M. J. J. Vrakking, B. Girard**

Spectroscopie de photofragments résolue en temps. Manipulation d'interférences et codage d'information dans une molécule en cours de prédissociation

COLOQ'7 (Rennes, 2001), A. Aspect, M. Brunel, and O. Emile ed., **J. Phys. IV France**, Vol. 12, pp. Pr5-253-54 (2002).

[P3] **R. Delhuille, C. Champenois, M. Büchner, L. Jozefowski, B. Aymes, A. Miffre, E. Lavalette, R. Sares, B. Viaris de Lesegno, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué**
Interféromètre de Mach-Zehnder atomique fonctionnant avec le lithium : premiers signaux
COLOQ 7 (Rennes, 2001), A. Aspect, M. Brunel, and O. Emile eds, **J. Phys. IV France**, Vol. 12, pp. Pr5-131-32 (2002).

[P4] **R. Delhuille, A. Miffre, B. Viaris de Lesegno, M. Büchner, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué**
Fringe contrast in Mach-Zehnder atom interferometers
Conference on Photons, Atoms and all that (Cracovie, Pologne), **Acta Physica Polonica B**, Vol. 33, pp. 2157-71 (2002).

[P5] **D. Field, N. C. Jones, J. P. Ziesel**
Time delays and cold collisions
International Meeting on Electron Scattering from Atoms, Nuclei, Molecules and Bulk Matter (Cambridge), C. T. Whetan and N. J. Mason ed., **Kluwer Academic/Plenum NY**, (2002).

[P6] **D. Field, S. L. Lunt, N. C. Jones, J. P. Ziesel**
Cold collisions of electrons with molecules: virtual state scattering in CO₂
Photonic, Electronics and Atomic Collisions (XXII ICPEAC) (Santa Fe, USA), D. Datz and al. eds, **Rinton Press**, pp. 2001 (2002).

[P7] **S. Zamith, V. Blanchet, B. Girard, J. Norin, J. Mauritsson, A. L'Huillier, J. Andersson, S. Sorensen, I. Hjelte, O. Bjorneholm, D. Gauyacq**
Predissociation dynamics of acetylene Rydberg states
Femtochemistry and Femtobiology: Ultrafast Dynamics in Molecular Science (Singapore), A. Douhal and J. Santamaria ed., **World Scientific**, pp. 43-53 (2002).

[P8] **S. Zamith, J. Degert, S. Stock, B. de Beauvoir, V. Blanchet, M. A. Bouchène, B. Girard**
Effect of Coherent Transients on a Pump-Probe Time Resolved Signal
Femtochemistry and Femtobiology: Ultrafast Dynamics in Molecular Science (Singapore), A. Douhal and J. Santamaria ed., **World Scientific**, pp. 559-67 (2002).

[P9] **S. Zamith, J. Degert, S. Stock, B. de Beauvoir, V. Blanchet, B. Girard**
Observation de transitoires cohérents excités par une impulsion ultracourte à dérive de fréquence
COLOQ'7 (Rennes, 2003), A. Aspect, M. Brunel, and O. ZEmile ed., **J. Phys. IV France**, Vol. 12, pp. 251-52 (2002).

2004

[P10] **V. Blanchet, J. M. L'Hermite, A. Le Padellec, B. Lamory, P. Labastie**
Vibrational relaxation of photoexcited Na₃F
Femtochemistry and Femtobiology: Ultrafast Events in Molecular Science, M. M. Martin and J. T. Hynes ed., **Elsevier**, pp. 57-61 (2004).

[P11] **M. A. Bouchene, J. C. Delagnes, M. Jacquy, S. Bonhommeau, P. Zahariev, A. Monmayrant, B. Chatel, B. Girard**

Propagation of ultrashort pulses in resonant atomic systems: Observation and control

COLOQ8 (Toulouse, 2003), A. Aspect, J. Vigué, and B. Girard ed., **J. Phys. IV France**, Vol. 119, pp. 13-18 (2004).

[P12] **M. Büchner, R. Delhuile, C. Robilliard, J. Vigué, A. Miffre, C. Champenois**

Diffraction phases in atom interferometry

COLOQ8 (Toulouse, 2003), A. Aspect, J. Vigué, and B. Girard ed., **J. Phys. IV France**, Vol. 119, pp. 139-40 (2004).

[P13] **B. Chatel, J. Degert, S. Stock, B. Girard**

Interférences entre chemins quantiques dans une transition en échelons

COLOQ'8 (Toulouse, 2003), A. Aspect, J. Vigué, and B. Girard ed., **J. Phys. IV France**, Vol. 119, pp. 151-152 (2004).

[P14] **B. Chatel, J. Degert, S. Stock, B. Girard**

Observation and manipulation of quantum interferences in ladder climbing

Ultrafast Phenomena XIV (Niigata), T. Kobayashi ed., pp. 861-63 (2004).

[P15] **D. Kaplan, P. Tournois, B. Chatel, A. Monmayrant**

Tunable wavelength pulse shaping of visible NOPA outputs with an Acousto-Optic Programmable Dispersive Filter

Ultrafast Phenomena XIV (Niigata), T. Kobayashi ed., **Springer**, pp. 70-72 (2004).

[P16] **A. Miffre, M. Jacquy, R. Delhuile, M. Büchner, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué**

An atom interferometer using thermal lithium atoms

COLOQ8 (Toulouse, 2003), A. Aspect, J. Vigué, and B. Girard ed., **J. Phys. IV**, Vol. 119, pp. 233-34 (2004).

[P17] **A. Monmayrant, B. Chatel, J. Degert, B. Girard**

Manipulation de transitoires cohérents avec des impulsions mises en forme

COLOQ'8 (Toulouse, 2003), A. Aspect, J. Vigué, and B. Girard ed., **J. Phys. IV**, Vol. 119, pp. 239-240 (2004).

[P18] **A. Monmayrant, B. Chatel, B. Girard**

Towards electric field reconstruction using coherent transients in a two-level system

Ultrafast Phenomena XIV (Niigata), T. Kobayashi ed., **Springer**, pp. 91-93 (2004).

[P19] **C. Rizzo, C. Robilliard, G. Tréneç**

La biréfringence magnétique du vide : théorie et expériences

COLOQ'8 (Toulouse, 2003), **J. Phys. IV**, Vol. 119, pp. 97 (2004).

2005

[P20] **M. Chabot, F. Mezdari, G. Martinet, K. Wohrer-Béroff, S. Della Negra, P. Désesquelles, H. Hamrita, A. Le Padellec, L. Montagnon, S. Diaz-Tendero, M. Alcamí, P. A. Hervieux, F. Martin**

Fragmentation of small carbon clusters

ICPEAC 2005 - XXIV International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, World scientific, (2005)

[P21] **B. Chatel, A. Monmayrant, B. Girard**

The atomic spirograph: atomic wave function and laser pulse shape measurements from coherent transients

ICOLS05 (Aviemore), (2005).

[P22] **G. Gay, B. Viaris de Lesegno, R. Mathevet, H. J. Lezec, J. Weiner**

Mapping of angular and spatial optical intensity distributions issuing from nanostructured slits, milled into subwavelength metallic layers, **Journal of Physics: Conference Series**, Vol. 19, pp. 102-108 (2005).

[P23] **A. Monmayrant, A. Arbouet, B. Girard, B. Chatel, B. J. Whitaker, A. Barman, D. Kaplan**

Optimisation of NOPA output pulse shaping using an AOPDF with dispersion self-correction
CLEO (QELS) (Baltimore), OSA, (2005).

[P24] **A. Monmayrant, B. Girard, B. Chatel**

Electric field reconstruction using coherent transients in a two-level system
CLEO (QELS) (Baltimore), OSA, (2005).

[P25] **C. O'Dwyer, G. Gay, B. Viaris de Lesegno, J. Weiner, M. Mützel, D. Haubrich, D. Meschede, G. Ludolph, G. Georgiev, E. Oesterschulze**

Advancing atomic nanolithography: cold atomic Cs beam exposure of alkanethiol self assembled monolayers †

Journal of Physics: Conference Series 19, 109-117 (2005).

11.4. Les autres publications : Livres, Sections de livres

2002

[B1] **T. Durt, J. Baudon, R. Mathevet, J. Robert, B. Viaris de Lesegno,**

Memory effects in atomic interferometry: a negative result

dans *Probing-the-Structure-of-Quantum-Mechanics.-Nonlinearity,-Nonlocality,-Computation,-Axiomatics*, édité par D. Aerts, M. Czachor, and T. Durt (World Scientific (Singapour), 2002), pp. 165-204.

2003

[B2] **N. Djuric, W. Zong, C. H. Greene, G. H. Dunn, A. Al Khalili, H. Danared, A. M. Derkach, M. Larsson, A. Le Padellec, A. Neau, S. Rosen, W. Shi, L. Viktor, M. Af Ugglas**

Ionic fragment production in dissociative electron-molecular ion collisions

dans *Dissociative Recombination : Theory, Experiment and Applications IV*, édité par M. Larsson, J. B. A. Mitchell, I. Schneider (World Scientific, 2003), pp. 56-68.

[B3] **A. Le Padellec**

Studies of electron collisions with CN^+ , CN^- and HNC^+/HNC^+

dans *Dissociative Recombination of Molecular Ions with Electrons*, édité par S. L. Guberman (Kluwer Academic / Plenum Publishers, 2003), pp. 109-25.

[B4] **A. Le Padellec, F. Rabilloud, D. J. Pegg, K. Andersson, D. Hanstorp, A. Neau, M. Larsson, F. Hellberg, R. Thomas**

Electron collisions with C_4^- : detachment process and resonant structure

dans *Dissociative Recombination of Molecular Ions with Electrons*, édité par S. L. Guberman (Kluwer Academic / Plenum Publishers, 2003), pp. 441-49.

[B5] **A. Le Padellec, X. Urbain, T. Nzeyimana, E. A. Naji**

Merged beam studies of associative ionization

dans *Dissociative Recombination of Molecular Ions with Electrons*, édité par S. L. Guberman (Kluwer Academic / Plenum Publishers, 2003), pp. 343-50.

[B6] **F. Rabilloud, A. Le Padellec, P. Labastie, J. M. L'Hermite, F. Spiegelman**

The metastable fragmentation of silver bromide clusters

dans *The Physics and Chemistry of Clusters*, édité par E. Campbell, M. Larsson (World Scientific, 2003), pp. 292-95.

[B7] **J. Weiner,**

Cold and Ultracold Collisions in Quantum Microscopic and Mesoscopic Systems,

(Cambridge University Press, Cambridge UK, 2003).

[B8] **J. Weiner, P.-T. Ho,**

Light-Matter Interaction, Fundamentals and Applications,

(Wiley & Sons, New York, 2003).

2004

[B9] **T. Amand, V. Blanchet, B. Girard, X. Marie**

Coherent control in atoms, molecules and solids

dans *in Femtosecond laser pulses. Principles and Experiments*, édité par C. Rullière (Springer, 2004), pp. 333-94.

[B10] **M. Belkacem, M. A. Bouchene, P. G. Reinhard, E. Suraud**

Photodynamics of nanoclusters

dans *Encyclopedia of nanoscience and Nanotechnology*, édité par H. S. Nalwa (American Scientific Publishers, 2004), Vol. 8, pp. 575-591.

2005

[B11] **B. Chatel and N. Forget**

Sources ultracourtes accordables : état de l'art

dans *Lasers et Technologies Femtosecondes*, édité par M. Sentis and O. Uteza (Publications de l'Université Saint-Etienne, Saint Etienne, 2005), pp ; 207-221.

[B12] **B. Chatel, B. Girard**

Coherent Control of Atomic Dynamics with Chirped and Shaped Pulses

dans *Femtosecond Laser Spectroscopy*, édité par P. Hannaford (Springer, 2005), pp. 267-304.

[B13] **B. Girard**

Le Contrôle cohérent

dans *Lasers et Technologies Femtosecondes*, édité par M. Sentis and O. Uteza (Publications de l'Université Saint-Etienne, Saint Etienne, 2005), pp. 261-78.

[B14] **F. Calvo, P. Labastie**

Chapitre III : Thermodynamique et transition solide-liquide

dans *Nanoscience, tome 2 : Nanomatériaux*, édité par M. Lahmani, P. Houdy (Belin, à paraître).

11.5. Publications obtenues avant l'entrée au laboratoire par des chercheurs recrutés récemment.

E. Springate, S. A. Aseyev, S. Zamith and M. J. J. Vrakking

Electron kinetic energy measurements from laser irradiation of clusters

Phys. Rev. A **68**, 053201-1-7 (2003).

A. Wetzels, A. Gürtler, F. Rosca-Pruna, S. Zamith, M. J. J. Vrakking, F. Robicheaux and W. J. van der Zante

Two-dimensional momentum imaging of Rydberg states using half-cycle pulse ionization and velocity map imaging

Phys. Rev. A **68**, 041401R-1-4 (2003).

F. Lépine, S. Zamith, A. de Snaijer, C. Bordas and M. J. J. Vrakking

Observation of large quadrupolar effects in a slow photoelectron imaging experiment

Phys. Rev. Lett. **93**, 233003-1-4 (2004).

S. Zamith, A. Gürtler, L. D. Noordam, H. G. Muller and M. J. J. Vrakking

Control of the ionization by few cycle two color pulses

Opt. Lett. **29**, 2303-5 (2004).

S. Zamith, T. Martchenko, Y. Ni, S. A. Aseyev, H. G. Muller and M. J. J. Vrakking

Control of the Production of Highly Charged Ions in Femtosecond Laser Cluster Fragmentation

Phys. Rev. A **70**, 011201-1-4 (2004).

S. Zamith, S. A. Aseyev, E. Springate and M. J. J. Vrakking

Control of the production of highly charged ions in femtosecond laser cluster fragmentation

dans *Femtochemistry and Femtobiology: Ultrafast Events in Molecular Science*, édité par M. M. Martin and J. T. Hynes (Elsevier; Harbound, ISBN 0-444-51656-5, 2004), pp. 119.

11.6. Statistiques sur les publications de l'Unité

Année	Publications dans revues avec Comité de lecture	Conférences invitées		Conférences avec actes	Livres Sections de livres
		Internationales	Nationales		
2002	40	9	10	9	1
2003	34	21	4		7
2004	35	16	9	10	2
2005	35 + 6 soumis	17	4	6	4

12. Les collaborations du LCAR

12.1. Le LCAR et l'IRSAMC

Des programmes locaux impliquant plusieurs laboratoires de l'IRSAMC sont actuellement financés :

- PPF « Théorie et expériences en chimie » *resp* C. Marsden (LPQ, LCC, LHFA, LCI, LSPCMIB, CEMES)
- PPF « Fermions fortement corrélés » *resp* D. Poilblanc (LPT, LPQ, LPST, LNCMP, CEMES, LCC)
- PPF « Organisation de nanoparticules » *resp* V. Paillard (LPST, LPQ, LAAS, LCC, LPMC)
- PPF « Contrôle cohérent et calcul quantique » *resp* B. Girard (LCAR, LPT, LNMO)
- CPER « Spectroscopies Optiques Ultimes » *resp* B. Girard (LCAR, LNMO, LPST). 460 k€ pour le LCAR.
- CPER « Nanosciences, Nanomatériaux, Nanotechnologies » *resp.* C. Joachim (CEMES). 320 k€ pour le LCAR.

Les collaborations explicites entre équipes du LCAR et équipes d'autres laboratoires de l'IRSAMC sont les suivantes :

- **Spectroscopie, dynamique et Thermodynamique d'agrégats** : équipe agrégats (LCAR) – F. Spiegelmann, F. Calvo, G. Durand, M.-C. Heitz (LPQ)
- **Etude théorique de Dynamique ultrarapide de systèmes moléculaires** : Equipe « théorie » (LCAR) – M.-C. Heitz, F. Spiegelmann (LPQ)
- **Dynamique de fragmentation de complexes de van der Waals** : Equipe « théorie » (LCAR) – N. Halberstadt (LPQ)
- **Surfaces de potentiel électronique** : Equipe « théorie » (LCAR) – C. Teichtel (LPQ)
- **Dynamique d'agrégats en champ laser intense** : équipe « femtosecondes » du LCAR – Dynamique des agrégats (E. Suraud (LPT))

Le LCAR est directement concerné par le projet de renforcement de la thématique « physique et chimie aux temps courts » mis en avant par la cellule de réflexion sur l'avenir de l'IRSAMC.

12.2. Le LCAR et ses autres collaborations locales

Projet de mesure de **biréfringence magnétique du vide** (BMV, C. Rizzo). L'enjeu est de vérifier une prédiction de l'électrodynamique quantique. Des résultats préliminaires obtenus récemment par une équipe italienne pourraient être expliqués par l'existence de la matière sombre prédite par les cosmologistes. L'expérience menée en collaboration avec l'équipe de G. Rikken (LNCMP) a les capacités d'infirmier ou de confirmer cette découverte qui aurait un retentissement important. Des travaux menés en collaboration avec G. Bignami (CESR) étudient la possibilité d'observation de ces effets dans les étoiles à neutron.

Le **contrôle cohérent à l'échelle femtoseconde** a été développé en parallèle au LNMO (X. Marie, T. Amand) et au LCAR (B. Girard). Cette collaboration, initiée en 1992 dans le cadre d'une action conjointe soutenue par le Ministère, a permis le développement des

études aux temps courts à Toulouse. De nombreux mécanismes de contrôle cohérent ont été tout d'abord identifiés et testés dans des atomes ou molécules au LCAR, puis appliqués à des systèmes à semi-conducteurs au LNMO. Cette collaboration a été soutenue par des PPF successifs, puis par le CPER « Spectroscopies Optiques Ultimes ».

Forte collaboration N. Lorente (LCAR) – H Tang (CEMES) sur la **simulation d'images STM, AFM et manipulation de nano-objets** (ACI jeunes chercheurs 2001-2004).

Collaboration J. Weiner (LCAR) - C. Girard (CEMES) sur l'étude théorique d'images produites en champ proche par des nanostructures.

Détermination de spectres et de résonances par les méthodes de la résolvente (B. Lepetit (LCAR) – X. Gadea (CEMES)).

Le LMTG (SDU) s'est récemment équipé d'un laser femtoseconde de puissance permettant l'ablation de matériaux variés, pour la géodatation et l'analyse chimique. Celui-ci est couplé à un spectromètre de masse de haute résolution via une torche à plasma (IPCMS). La collaboration avec l'équipe « femtoseconde » du LCAR (B. Chatel) porte sur l'optimisation du processus (forme et nombre d'impulsions) afin de réduire le fractionnement chimique.

Une collaboration a été initiée en 2004 (BQR interdisciplinaire) entre B. Chatel (équipe « femtoseconde » du LCAR) et L. Salomé (IPBS (SDV)) sur des problèmes **d'imagerie haute résolution de nanoparticules** dans le but d'observer les mouvements de cellules biologiques.

12.3. Le LCAR et ses collaborations nationales

Structures nationales :

- **GDR « Fragmentation, agrégation et thermodynamique de systèmes complexes isolés »** (JM L'hermite, membre du bureau) : Finance de nombreuses collaborations (pour le LCAR, avec le LASIM (Lyon)).
- **Réseau de Diffusion des Technologies femtosecondes** (B. Chatel, coordinatrice depuis oct. 2004).
- **GDR « Optique atomique »** créé par C. Robilliard.

Equipe « Agrégats »

- P. Dugourd (LASIM, Lyon) : mesure de la polarisabilité des agrégats NaF
- C. Bréchignac (LAC, Orsay) : Etudes de thermodynamique d'agrégats.
- F. Rabilloud (LASIM, Lyon) : calculs d'énergies de photodétachement d'agrégats AgF

Equipe « Interférométrie Atomique »

a) avec F. Balembois (**Laboratoire Charles Fabry de l'Institut d'Optique** à Orsay) et P. Juncar (**INM-BNM au CNAM** à Paris) depuis fin 2003. Développement d'un laser à 671 nm par doublage d'un laser à 1342 nm pompé par diode de puissance à 808 nm. Ces deux groupes ont développé un laser assez analogue à 1320 nm. Ce laser pourra intéresser toutes les équipes travaillant sur l'atome de lithium et peut-être de manière plus large car nous espérons un laser intense (plusieurs Watt) et monofréquence. La question publication ou brevet pour valorisation n'est pas tranchée actuellement.

b) avec O. Cugat (**Laboratoire d'Electrotechnique, INPG/UJF – CNRS (STIC) UMR 5529**), pour le développement d'aimants pour isolateur optique de hautes performances et diode optique. Les isolateurs optiques intéressent A. Brillet pour le grand interféromètre Virgo. Première demande de brevet déposée auprès du CNRS DAE (Juin 2004). Un

prototype donnant 1.73 Tesla a été réalisé et un deuxième prototype donnant 1,64 Tesla dans un diamètre de 22 mm a été construit. Une deuxième demande de brevet sera présentée très prochainement.

- c) En projet un **réseau " OPTIQUE ATOMIQUE QUANTIQUE "** (programme Midi-Pyrénées – PACA en cours d'examen), regroupant 3 équipes de recherche et 2 PME :
- l'équipe « Interférométrie Atomique » du LCAR,
 - l'équipe de F. Vedel au laboratoire PIIM-Physique des Interactions Ioniques et Moléculaires UMR6633 CNRS-UAM1 (Dir. PR R. Stamm) Université de Provence Centre de Saint- Jérôme,
 - l'équipe de R. Kaiser et Ch. Miniatura à l'INLN- Institut Non Linéaire de Nice, UMR 6618 du CNRS (Dir. PR J. Tredicce), Université de Nice-Sophia Antipolis, 1361, route des Lucioles, 06560 Valbonne,
 - CILAS- Marseille, Zi Saint-Mitre, av. de la Roche Fourcade, 13400 Aubagne, pour la fabrication de miroirs de haute finesse,
 - GECODAGIS SARL, 16, rue d'Auriac, 31310 Rieux Volvestre, pour la caractérisation de vibration de nos montages expérimentaux.

Equipe « Biréfringence Magnétique du Vide »

- **Réalisation d'une cavité de très haute finesse optique** (Mackowski (LMA Lyon))

Equipe « nano » (Manipulations d'atomes par champs proches issus de nanostructures)

- Réseaux de nanophotocathodes (G. Lampel, LPMC, Ecole Polytechnique, Palaiseau)

Equipe « Spectroscopie femtoseconde et contrôle cohérent »

- **Dynamique femtoseconde des états de Rydberg de l'acétylène** (D. Gauyacq, LPPM Orsay), programme PCMI de l'INSU.
- **Développement de techniques de mesure d'impulsion lasers ultracourtes** (JP Chambaret (LOA, Palaiseau)).
- Caractérisation d'un **façonneur d'impulsion visible (DAZZLER)**. Application à la mise en forme d'un NOPA (Amplificateur paramétrique Optique Non-colinéaire) Société Fastlite (Palaiseau).
- **Développement d'un NOPA** (Société Amplitudes Technologies (Evry)).
- **Application d'impulsions attoseconde** (CELIA, Bordeaux)

Equipe « Spectrométrie d'électrons dans les collisions»

Collisions ion - fullerène C₆₀ :

- Collaboration théorie - expérience avec F. Martin (UAM, Madrid) - P.A. Hervieux (Metz) -M.F. Politis (GPS, Paris) sur He²⁺ + C₆₀.
- Collaboration avec Bernd Huber (CIRIL-GANIL, Caen) sur ion multichargé C₆₀ à des énergies de l'eV (formation d'endofullerène).

Ion-molécule biologique :

- Collaboration avec M. et B. Farizon (Institut Physique Nucleaire Lyon) sur les molecules biologiques solvatées
- K. Wohrer (LCAM Orsay) sur les petits agrégats de Carbone

Equipe « Collisions ions – surface »

LGE Toulouse (Patrice Raynaud) et **Laboratoire IMP à Perpignan** : premiers tests d'analyse de composition de dépôts à partir d'organo-silices (mesure de la quantité d'hydrogène en particulier).

Equipe « Théorie »

- M.-L. Bocquet, ENS chimie Lyon, co-tutelle de thèse de Hervé Lesnard. Excitation vibrationnelle avec le microscope à effet tunnel.
- B. Grandidier, ISEN Lille, excitation vibronique sur surface de semiconducteurs.
- A. Salim, LPCM Bordeaux, dissociation de H₂ sur les métaux.

12.4. Le LCAR et ses Collaborations internationales

(seules sont répertoriées les collaborations financées ou ayant donné lieu à publications)

Equipe « Agrégats »

- Programmes d'action intégrés (PAI) du Ministère des Affaires Etrangères :
 - § PROCOPE avec L. Wöste (Berlin) (2003-2004) *et équipes théorie, femtoseconde*

Equipe « Optique - Interférométrie Atomique »

- Programmes d'action intégrés (PAI) du Ministère des Affaires Etrangères :
 - § PROCOPE avec J. P. Toennies au Max Planck Institute für Strömungsforschung à Göttingen (PROCOPE MAE, 2002-04): mesure par interférométrie atomique de la neutralité électrique de l'atome d'hélium.

Equipe « Optique - Biréfringence Magnétique du Vide »

- Programme OTAN puis RI CNRS avec D. Bakalov (Sofia) (2002-2003) *et équipe Théorie*
- Chercheur invité CNRS : G. Bialolenker (Beer Sheva (Israël)) (2004-2005)
- A. Rizzo (Pise) : Calculs d'effet Kerr
- Programmes d'action intégrés (PAI) du Ministère des Affaires Etrangères :
 - § ARC EN CIEL : C. Rizzo / A. Arie et G. Bialolenker (Université de Tel Aviv Beer Sheva, Israël 2001-2002)

Equipe « nano » (Manipulations d'atomes par champs proches issus de nanostructures)

- Réseaux européens :
 - § FASTNet (Field Atom Surface Training Network) RTN, (2002-2006) *J. Weiner PI*
 - § NANOCOLD (Manipulation d'atomes froids par forces lumineuses) IST (2003-2004)
 - § ATOMSURF en cours d'évaluation, *J. Weiner PI*
- Programmes d'action intégrés (PAI) du Ministère des Affaires Etrangères :
 - § STAR avec Seoul National University, Physics Department
- Programme COFECUB avec V. Bagnato et L. G. Marcassa (Istituto de Fisica de Sao Carlos (Brésil)) : Etudes de collisions froides

Equipe « Spectroscopie Femtoseconde et Contrôle Cohérent »

- Réseaux Européens Marie Curie :
 - § COCOMO (COherence and COntrol in atomic and MOlecular systems) *RTN FP5* (2000-2004)
 - § XTRA (Generation of X-rays Attoseconde and Applications) avec CELIA *RTN FP6* (2004-2008)
 - § CAMEL avec Sofia *TOK FP6*
- Programmes d'action intégrés (PAI) du Ministère des Affaires Etrangères :
 - § PROCOPE avec G. Gerber (Würzburg), L. Wöste (Berlin) (2003-2004) *et équipes théorie, agrégats*
 - § SAKURA avec K. Ohmori (ILMS, Okazaki) *et équipe théorie* (2005-2006)
 - § VANGOGH avec M. Vrakking (AMOLF, FOM Amsterdam) (1998-2003)
- Relations Internationales CNRS et chercheur invité CNRS:
 - § A. Stolow (NRC Ottawa) (2003-2004)
 - § B. Whitaker (Leeds) (2005-2006)
- Actions Ponctuelles UPS (et invitations UPS)
 - § M. Motzkus (MPQ Garching)
 - § W. Schleich (Ulm)
 - § N. Vitanov (Sofia)

Séjour de longue durée dans des laboratoires étrangers :

- Cavendish Laboratory Cambridge (GB) : V. Blanchet (1 an en 2003-2004)
- UCSB-Santa-Barbara (USA) : V. Blanchet (3 mois en 2005)

Equipe « Spectrométrie d'électrons »

- Programmes Européens :
 - § Réseau européen COST P9 'RADAM' Radiation damages in biomolecular system (2003-2007)
 - § Réseau LEIF (Low Energy Ion beam Facility) (2000-2003) et (2005-2009)
- X. Urbain (UCL, Belgique) sur les processus d'association dans les collisions ions-molécules

Equipe « Collisions ions – surface »

- USTBH (Alger) : Collaboration informelle suite a un contrat CMEP terminé en 2000 : mise a disposition du dispositif expérimental chaque année sur une période de 1 mois environ.
- Département de Physique et Astronomie, Université d'Aarhus, Danemark (D. Field), The Open University, Milton Keynes, Angleterre (N.J. Mason), Queen's University, Belfast, Irlande du Nord (T.A. Field), collaboration de J.-P. Ziesel sur les collisions d'électrons de très basse énergie.
- Programme Européen :
 - § EPIC (2002-2005) : Electron and Positron Induced Chemistry (J.-P. Ziesel)

Equipe « Théorie »

- Programmes d'action intégrés (PAI) du Ministère des Affaires Etrangères :
 - § PROCOPE avec C. Voyvod (Munich) (2004-2005), L. Wöste (Berlin) (2003-2004 *et équipes agrégats, femtosecondes*), V. Engel (Würzburg) (2003-2004), J. Pascual (Berlin) (2005-2006)
 - § BARRANDE avec I. Páidarova (Prague)
 - § VAN GOGH avec G.-J. Kroes (Leyden) (2001-2002)
 - § PICASSO avec O. Roncero (Madrid) soutien aussi des RI CNRS (2004-2005)

- INTAS avec O. Vasyutinskii (St-Petersburg), A. Buchachenko (Moscou)
- Programme OTAN (2002-2003) puis RI CNRS avec D. Bakalov (Sofia) (2004-2005)
et équipe BMV
- Chercheur invité CNRS et Ambassade de France au Danemark :
 - § M. Brandbyge, DTU Lyngby Danemark
- Actions Ponctuelles de coopération UPS
 - § Etats-Unis : A. Kupperman (Berkeley), B. Jackson (Massachusetts)
 - § Russie : A. Buchachenko, Tsikerbul
 - § Allemagne
- Ambassade de France au Canada : H. Guo, McGill Montréal Québec
- Japan Society for the promotion of Science 2004 : H. Ueba, Toyama University, Japon.

15.4. Responsabilités en dehors du LCAR

- **A l'Université Paul Sabatier**

- *Administration* :

- . Martine Sence : directrice adjointe de l'UFR PCA (membre du CA et du bureau)
- . Conseil Scientifique de l'UFR PCA : Béatrice Chatel (membre du bureau 2003-2006), Carlo Rizzo (2003-2006), Bertrand Girard (1995-2003)

- *Evaluation* :

Commission des spécialistes 29^{ème} section UPS : Jean-Marc L'Hermite (2000-2004)

Commission des spécialistes 30^{ème} section UPS :

Pierre Labastie (Président 2000-2004), Carlo Rizzo (vice-président 2001-2004), Jacques Vigué (vice-président Collège A 2005-...), Nicolas Lorente (vice-président Collège B 2005-...), Alberto Beswick (2005-...), Renaud Mathevet (2003-...), Arnaud Le Padellec, Martine Richard-Viard (1998-...), Patrick Moretto-Capelle (2005-...), M. Aziz Bouchène (1993-2004), Cécile Robilliard (2003-2004), Christoph Meier (2001-2003, suppléant depuis 2005), Martine Sence, Valérie Blanchet (suppléante 2005-...), Matthias Büchner (suppléant 2005-..., membre du bureau (assesseur)),

Commission des spécialistes 31^{ème} section UPS : M. Aziz Bouchène (suppléant 2004-...)

Commission des spécialistes 34^{ème} section UPS : Alberto Beswick (suppléant 2004-...)

- *Enseignements* :

Conseil du Département de Physique : Carlo Rizzo, M. Aziz Bouchène

Master de Physique de l'UPS : Alberto Beswick (responsable)

Master 2 « Physique de la matière » : Mohamed Aziz Bouchène (co-responsable)

Licence 1 de Physique : Pierre Labastie (responsable)

Programme d'échange ERASMUS pour le domaine Physique : Carlo Rizzo (responsable 2002-2004), Christoph Meier (responsable depuis 2005)

Agrégation de Physique : Renaud Mathevet (responsable depuis 2005)

- **Autres Universités**

- *Evaluation* :

Commission des spécialistes 30^{ème} section Université Cl. Bernard Lyon I : Jacques Vigué

Commission des spécialistes 30^{ème} section Université de Provence Aix-Marseille : Jacques Vigué

Commission des spécialistes 30^{ème} section Université de Bordeaux 1 : M. Aziz Bouchène

Commission des spécialistes 30^{ème} section Université de Perpignan :

Martine Richard-Viard (2005-...), Nicolas Lorente (2005-...), Christoph Meier (suppléant depuis 2005), Martine Sence (suppléante)

- **Dans des Instances nationales d'évaluation de la recherche**

- CNU 30^{ème} section : Arnaud Le Padellec (2nd vice-président, membre de la Conférence Permanente du CNU), Pierre Labastie (1999-2003), Jacques Vigué (1999-2003), Martine Sence (2003-...)

- *CNRS*

Comité National Section 04 : Bertrand Girard (membre 1995-2004, membre du bureau 2000-2004), Jean-Marc l'Hermite (2000-2004), Pierre Labastie (membre du bureau 2004-2008)

Jury d'admission CR du département SPM : Bertrand Girard (2001-2003)

Président de Comités d'évaluation : Bertrand Girard (LOA 2004, LIXAM 2005)

Evaluation Bourse Marie Curie : Bertrand Girard (2003-2005), John Weiner (2002-2005)

Expertises pour la mission scientifique, technique et pédagogique : Alberto Beswick, Bertrand Girard, Pierre Labastie, Jacques Vigué,

Expertises pour l'ANR : Alberto Beswick, Bertrand Girard, Pierre Labastie, Jacques Vigué

• **Activité Editoriale**

- « European Physical Journal D » : Jacques Vigué (Co-éditeur du journal 1998-2003)
- « Physical Chemistry Communication » : Alberto Beswick (Membre du bureau éditorial 2000-2003)

• **Organisation de manifestations scientifiques**

- Coloq'8-Horizons de l'Optique : Jacques Vigué (Président du comité local d'organisation, Toulouse septembre 2004)
- Ecole d'été « Coherent Control in Atomic and Molecular Systems Summer School » : Bertrand Girard, (responsable, Cargèse 30 sept-5octobre 2002)
- Colloque « QED 2005, Quantum Vacuum and search for New Forces » : Carlo Rizzo (Coorganisateur et codirecteur des cours, Ecoles des Houche du CNRS, 5-9 juin 2005)
- Ecole Franco-Syrienne « Laser-matter interaction » : M. Aziz Bouchène (organisateur, Université d'El Baath, Homs, 15-20 novembre 2005)

• **Sociétés savantes**

- Comité Française de Physique : Jacques Vigué (membre nommé, 2001- ...)
- Société Française de Physique (SFP) : Valérie Blanchet (secrétaire section locale (2001-2005) et organisatrice des séminaires en Midi-Pyrénées (2001-2003), membre du bureau de la division de Physique Atomique Moléculaire et Optique (PAMO) (2005-...), Arnaud Le Padellec (secrétaire de la division PAMO 2001-2004, membre du CA 2005-...), Jacques Vigué (Président de la Section Locale 2005-2006)
- European Physical Society : Jacques Vigué (membre du bureau de la division de Physique Atomique et Moléculaire)

• **Animation de la communauté scientifique**

Comité de pilotage du réseau des technologies femtoseconde : Béatrice Chatel (membre 2000-2004 puis présidente 2005-2008)

Programmes pluriformations : Bertrand Girard (responsable du PPF « Contrôle des états cohérents » 1999-02, responsable du PPF « Contrôle cohérent et information quantique » 2003-2006)

Conseil Scientifique du Programme National « Physique et Chimie du Milieu Interstellaire » : Bertrand Girard (1996-2002)

GDR « Agrégats » : J.M. L'Hermite (membre du bureau)

GDR « Optique Atomique Intégrée et Nanostructures » : Cécile Robilliard (directrice 2002-2004)

