



## Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité UMR 5589 (CNRS – Université Toulouse 3)

---

### Rapport d'activité 1998-2001

---

### Table des matières

0. Table des matières.....	1
1. Organigramme de l'Unité.....	3
2. Message du Directeur de l'Unité.....	5
3. Structure, dynamique et thermodynamique des agrégats.....	15
4. Interférométrie atomique et applications aux nanostructures .....	37
5. Spectroscopie moléculaire ultrarapide et contrôle cohérent .....	65
6. Spectrométrie d'électrons dans les collisions.....	95
7. Interactions Ion-Surface .....	111
8. Théorie des processus dynamiques dans les systèmes moléculaires.....	125
9. Collisions froides électron-molécules à haute résolution avec des photoélectrons synchrotron .....	143
10. Publications de l'ensemble du laboratoire .....	151
11. Activités internationales des équipes .....	177
12. Bilan financier .....	181
13. Bilan sur l'évolution du personnel de l'Unité .....	187
14. La formation dans l'Unité .....	193
15. Compte-rendu du Conseil de laboratoire du 30 novembre 2001 .....	195
16. Hygiène et sécurité .....	197

# 1. Organigramme de l'Unité

## 1.1. Les équipes de recherche au 31 décembre 2001

Structure, dynamique et thermodynamique des agrégats	Optique atomique et applications aux nanostructures	Spectroscopie moléculaire ultrarapide et contrôle cohérent
<ul style="list-style-type: none"> <li>• <u>LABASTIE</u> Pierre (PR)</li> <li>• LE PADELLEC Arnaud (MCF)</li> <li>• L'HERMITE Jean-Marc (CR)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <u>VIGUE</u> Jacques (DR)</li> <li>• <u>WEINER</u> John (PR)</li> <li>• RIZZO Carlo (PR)</li> <li>• BÜCHNER Matthias (CR)</li> <li>• MATHEVET Renaud (MCF)</li> <li>• ROBILLIARD Cécile (CR)</li> <li>• VIARIS DE LESEGNO Bruno (ATER)</li> <li>• DELHUILLE Rémi (Doctorant)</li> <li>• LEVEQUE Gaëtan (Doctorant)</li> <li>• MIFFRE Alain (Doctorant)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <u>GIRARD</u> Bertrand (PR)</li> <li>• BLANCHET Valérie (CR)</li> <li>• BOUCHENE Aziz (MCF)</li> <li>• HERISSON de BEAUVOIR Béatrice (CR)</li> <li>• DEGERT Jérôme (Doctorant)</li> <li>• ZAMITH Sébastien (Doctorant)</li> </ul>

Spectrométrie d'électrons dans les collisions	Interaction ion-surface	Théorie des processus dynamiques dans les systèmes moléculaires
<ul style="list-style-type: none"> <li>• <u>BORDENAVE-MONTESQUIEU</u> Alain (DR)</li> <li>• BORDENAVE-MONTESQUIEU Danièle (IR)</li> <li>• MORETTO-CAPELLE Patrick (CR)</li> <li>• RENTENIER Arnaud Arnaud (Doctorant)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <u>BENAZETH</u> Claude (PR)</li> <li>• <u>RICHARD-VIARD</u> Martine (CR)</li> <li>• BENOIT-CATTIN Pierre (PR émérite)</li> <li>• ZIESEL Jean-Pierre (DR)</li> <li>• CAFFARELLI Pierre (MCF)</li> <li>• NIEUWJAER Nicolas (Doctorant)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <u>BESWICK</u> Alberto (PR)</li> <li>• <u>LORENTE</u> Nicolas (MCF)</li> <li>• DAUDEY Jean-Pierre (DR)</li> <li>• LEPETIT Bruno (CR)</li> <li>• MEIER Christoph (MCF)</li> <li>• DUPAYS Arnaud (Doctorant)</li> <li>• GINDENSPERGER Etienne (Doctorant)</li> </ul>

### 3. Structure, dynamique et thermodynamique des agrégats

#### 3.1. Composition de l'équipe

Responsable : P. Labastie, professeur

Permanents : A. Le Padellec, Maître de conférence, depuis février 2000  
J.-M. L'Hermite, Chargé de recherche  
M. Sence, Maître de conférence, a participé aux activités de l'équipe jusqu'en 1999

Doctorant : F. Rabilloud, allocataire MENRT 1997–2000

Stagiaires : L. Marcou, DESU 1998–1999  
N. Javahiraly, Maîtrise 1998  
C. Géraud, Maîtrise 1999  
M. Lasserre, Maîtrise 1999  
J. Léonard, DEA 1999  
P. Labro, Maîtrise 2000  
J.-Ph. Barbaste, DEA 2001  
S. Batut, Maîtrise 2001

#### 3.2. Compte-rendu de l'activité scientifique

##### 3.2.1. Introduction

Si l'activité de l'équipe au cours des deux premières années du contrat (1999–2000) a surtout été de modifier l'expérience pour travailler avec des agrégats de bromure d'argent, les deux années suivantes ont été consacrées essentiellement à des études théoriques sur ces mêmes agrégats, en collaboration avec l'équipe de F. Spiegelman. Nous avons en effet observé une stabilité particulière de l'agrégat  $\text{Ag}_3\text{Br}_3$ , ce qui ne peut en aucun cas être expliqué par les modèles simples que nous avons développés pour les agrégats de fluorure de sodium.

Ces modèles simples, par contre, permettent d'interpréter la réponse des agrégats de sel ( $\text{CsBr}$ ,  $\text{CsCl}$ ,  $\text{NaF}$ ) à un champ statique. Néanmoins, cette réponse est due à la fois au dipôle permanent provenant du réseau d'ions et à la polarisabilité électronique de ces agrégats, et présente donc un caractère nouveau par rapport aux études spectroscopiques, qui ne font intervenir que la réponse électronique. Nous avons collaboré avec l'équipe de Ph. Dugourd à Lyon pour ces études.

Parallèlement, l'équipe a beaucoup réfléchi aux problèmes d'évaporation des agrégats (il s'agissait de comprendre entre autres l'évaporation préférentielle d' $\text{Ag}_3\text{Br}_3$ ), ce qui nous a amenés à collaborer d'abord de manière informelle, puis de manière plus officielle avec les équipes de H. Haberland (Fribourg, Allemagne) et de C. Bréchnac (Laboratoire A. Cotton, Orsay). Il est apparu que le processus inverse (collage d'atomes) n'était pas bien connu non plus. C'est ce qui conduit notre équipe à s'orienter, toujours en collaboration avec les deux équipes citées, vers une étude de ce processus inverse au cours du prochain contrat.

### 3.2.2. Développements expérimentaux

#### 3.2.2.1. Spectroscopie de dépopulation à un seul coup laser

Dans les techniques de spectroscopie de dépopulation, on compare le signal (sur une masse donnée) obtenu quand le laser qui dépeuple est absent (référence) au signal obtenu en présence de ce laser. Ceci nécessite en général au minimum deux tirs lasers, et on est limité par le bruit d'une impulsion à l'autre. Nous avons mis au point une méthode qui ne nécessite qu'un coup laser. En effet, il est possible, dans notre spectromètre de masse à réflectron, de connaître l'origine spatiale des agrégats observés. En tirant le laser sur une partie du volume concerné, on peut ainsi comparer directement les agrégats qui ont reçu le laser à ceux qui ne l'ont pas reçu. Le gain en bruit du système peut être assez grand.

#### 3.2.2.2. Rapports de branchement de fragmentation

Nous avons montré comment, dans un spectromètre de masse à réflectron, il est possible, en variant la tension de réflexion, de connaître à la fois la masse du parent et celle du fragment correspondant à un pic donné. On peut ainsi obtenir le spectre de fragmentation de l'ensemble des parents en enregistrant environ une dizaine de spectres de masse. Ceci est à comparer aux méthodes où l'on sélectionne un parent, qui nécessitent un spectre de masse pour chaque parent. Cette méthode originale a fait l'objet d'une publication [*Rev. Sci. Ins.*, 71, 2033 (2001)]. Le détail de la méthode est donné dans la partie sur les agrégats de bromure d'argent.

#### 3.2.2.3. Résultats scientifiques obtenus à Toulouse

Après des travaux sur les agrégats de fluorure de sodium, le groupe « agrégats » s'est orienté en 1998 vers l'étude expérimentale et théorique des agrégats de bromure d'argent.

L'étude du bromure d'argent est motivée par l'implication de ce matériau dans un phénomène encore partiellement incompris aujourd'hui : la sensibilisation d'une pellicule photographique par la lumière (ou formation de « l'image latente »). On sait depuis les travaux de P. Fayet et al [*Z. Phys. D* 3, 299 (1986)] et de J. Belloni et al [*Z. Phys. D* 12, 31 (1989)] que celle-ci est essentiellement due à la formation d'agrégats d'argent de petite taille sur un substrat (« grains ») d'AgBr. Ceci rappelle les phénomènes de ségrégation métal-isolant que nous avons observés dans les agrégats de fluorure de sodium. Néanmoins, on ignore à l'heure actuelle comment se forment ces agrégats sous l'action de la lumière. La dernière proposition de mécanisme date de 1955 et est loin d'être satisfaisante. Aucune étude expérimentale récente ne s'est intéressée à ce processus d'un point de vue fondamental ! Sur le plan théorique, plusieurs groupes se sont intéressés à ce problème ces dernières années mais sans succès probant. Flad *et al* [*Z. Phys. D* 15, 79 (1990)] ont étudié la localisation de monomères et de dimères d'argent dans des défauts de surfaces, mais avec un modèle trop élémentaire dont nous savons aujourd'hui qu'il ignore des aspects importants de l'interaction  $\text{Ag}^+ - \text{Br}^-$ . Le groupe de V. Koutecký (Berlin) s'est également intéressé récemment (1998) à la modélisation *ab initio* d'agrégats de bromure d'argent mais a abandonné ce sujet faute de résultats satisfaisants [*communication privée, colloque TAMC III, Berlin, 1999*]. Ce thème était donc d'actualité mais semblait particulièrement ardu. Il nous a semblé que la synergie due à la cohabitation dans le même institut (l'IRSAMC) de notre groupe expérimental et de théoriciens spécialistes des agrégats, qui avait déjà fait ses preuves dans le cadre de l'étude des agrégats de fluorure de sodium, était susceptible de favoriser l'éclosion d'une modélisation enfin réaliste des agrégats de bromure d'argent, systèmes plus complexes qu'il n'apparaît à première vue et jusqu'ici plutôt réfractaires à l'analyse.

C'est pourquoi nous nous sommes proposés d'étudier expérimentalement et théoriquement les propriétés de ces agrégats. L'acquisition de connaissances approfondies sur ces systèmes a un intérêt intrinsèque puisque ce type d'agrégat est encore très mal connu. Les interactions locales et non locales entre brome et argent sont mal connues. On considère en première approximation qu'elles sont de nature ionique, impliquant seulement des ions  $\text{Ag}^+$  et  $\text{Br}^-$ . Le solide  $\text{AgBr}$  est un cristal ionique  $\text{Ag}^+\text{Br}^-$  très proche par sa structure des solides d'halogénures d'alcalins. Cependant, les physiciens du solide ont montré que certaines propriétés, par exemple le changement de phase structurale (de type  $\text{NaCl}$  vers le type  $\text{CsCl}$ ) à haute pression ou bien la dispersion anormale des phonons, sont probablement dues à la contribution d'une interaction non ionique, sans pouvoir l'expliquer exactement.

### 3.2.3.1. Expériences

La première phase de cette étude fut la mise au point d'une source d'agrégats d' $\text{AgBr}$ . Nous avons conservé comme principe de production la vaporisation laser. Cependant, la méthode utilisée pour produire les agrégats de fluorure de sodium (un barreau de sodium vaporisé dans un mélange de gaz neutre et de l'hexafluorure de soufre  $\text{SF}_6$ ) s'est avérée inadéquate, pour des raisons de fiabilité et de sécurité : il n'existe malheureusement pas de composé gazeux équivalent à l'hexafluorure de soufre (peu toxique, peu corrosif et facile à dissocier) susceptible de fournir les atomes de brome (un barreau d'argent étant quant à lui très facile à réaliser). Nous avons finalement trouvé, non sans mal, un industriel capable de nous fournir des barreaux de bromure d'argent solide frittés.

Le potentiel d'ionisation des agrégats de bromure d'argent est élevé ( $>6$  eV), et inaccessible aux lasers courants. Nous avons donc décidé d'étudier (au moins dans un premier temps) les espèces chargées déjà formées dans la source. Il est en principe très simple dans un spectromètre de masse à temps de vol de passer de l'analyse d'espèces neutres à l'analyse d'espèces chargées : il « suffit » de pulser la (ou les) haute(s) tension(s) des plaques d'accélération. Dans la réalité, surtout s'agissant d'agrégats d' $\text{AgBr}$ , les choses ne furent pas si simples. Il nous a fallu améliorer la résolution de notre spectromètre de masse dans son mode d'analyse des espèces chargées pour deux raisons : d'une part, la résolution d'un spectromètre de masse à temps de vol est dégradée lorsqu'on passe de l'étude des espèces neutres à l'étude d'espèces chargées, d'autre part, l'argent et le brome ont naturellement deux isotopes d'abondance égale, ce qui congestionne considérablement les spectres de masse. En fait, il n'existait pas d'études détaillées du fonctionnement d'un spectromètre de masse de type « temps de vol avec un réflectron » en mode de détection d'ions, et nous avons montré que certaines idées courantes étaient erronées : en particulier, il est parfaitement possible d'obtenir des pics (dans le spectre de masse) de largeur temporelle largement inférieure au temps de montée de l'impulsion haute tension appliquée aux plaques d'accélération. Avec un choix judicieux des paramètres de fonctionnement, nous avons obtenu des pics de largeur à mi-hauteur de moins de 15 ns avec un temps de montée de la haute tension de l'ordre de 80 ns. Cette étude détaillée nous a donc fait faire des économies d'argent substantielles sur les relais haute tension !

La première étape de notre étude a consisté à produire des spectres de masse d'agrégats de bromure d'argent chargés positivement et négativement. Ces spectres montraient qu'à l'évidence (prédominance des espèces stœchiométriques c'est-à-dire comportant autant d'électrons que d'atomes de brome, agrégat  $\text{Ag}_{14}\text{Br}_{13}$  « magique »...) ces agrégats étaient de nature ionique, c'est-à-dire constitués d'ions  $\text{Ag}^+$  et  $\text{Br}^-$ . Ceci était probable (le solide  $\text{AgBr}$  possède la structure cristalline de  $\text{NaCl}$ ) mais pas évident *a priori*. Les spectres de cations contiennent principalement les espèces  $\text{Ag}_n\text{Br}_{n-1}^+$ , comme dans le cas de  $\text{NaF}$ , mais aussi en quantité non négligeable  $\text{Ag}_n\text{Br}_{n-2}^+$  et  $\text{Ag}_n\text{Br}_{n-3}^+$  (ce n'était pas le cas pour  $\text{NaF}$ ).  $\text{AgBr}$  a donc

une propension à la ségrégation supérieure à NaF. Une première explication simple semble être que l'énergie de liaison des agrégats d'argent (purs) est très supérieure à celle des agrégats de sodium (l'énergie de liaison de  $\text{Ag}_2^+$  est déjà environ 2 fois supérieure à celle de  $\text{Na}_2^+$ ). Nous avons également noté la stabilité particulière de certaines espèces ( $\text{Ag}_3\text{Br}_3^-$ ,  $\text{Ag}_5\text{Br}_4^+$  notamment) qui ne s'explique pas par des raisons purement électrostatiques.

Nous avons ensuite entrepris de réaliser des mesures de bandes d'absorption dans le visible à l'aide d'un OPO acquis en 1997, de manière similaire à ce que nous avons fait sur les agrégats NaF (R2PI, photodépopulation). Malheureusement, aucune bande d'absorption détectable n'a été vue dans le domaine spectral accessible. Ceci n'était pas à vrai dire surprenant, puisqu'on sait que le solide AgBr n'a pas de bandes d'absorption dans le visible (celles-ci sont situées dans l'uv proche, jusqu'au violet, inaccessible à notre OPO). On savait déjà qu'un cristal d'AgBr (et donc une émulsion photographique « brute ») n'était en effet pratiquement pas sensible à la lumière visible (elle ne l'est que par l'action de molécules « de conversion »).

En irradiant les agrégats avec le faisceau d'un laser Nd:YAG triplé en fréquence (355nm) d'assez forte fluence (50 mJ par pulse, soit  $1\text{MW}/\text{cm}^2$ ), nous avons constaté que la distribution était considérablement modifiée, les espèces de type  $[(\text{Ag}_n\text{Br}_{n-1})^+\text{Ag}_4]$  devenant prépondérantes. Bien que les conditions de formation diffèrent, ceci peut être rapproché du processus de formation de l'image latente en photographie, dans laquelle, sous l'action de la lumière, on isole de la même manière un agrégat  $\text{Ag}_4$  à la surface d'un substrat stoechiométrique.

Nous avons utilisé un autre moyen d'investigation des propriétés des agrégats libres : l'étude de leurs voies de fragmentation. Il existe des méthodes d'analyse de la fragmentation utilisant un réflectron, mais là encore, les méthodes « classiques » se sont révélées inefficaces, à cause de la richesse de nos spectres résultant à la fois de la présence de stoechiométries variées ( $\text{Ag}_n\text{Br}_p$  avec p variable) et de la contribution des différents isotopes. Il était impossible d'affecter à un signal donné un couple (parent–fragment) sans ambiguïté. Nous avons donc développé une nouvelle méthode d'étude de la fragmentation métastable d'agrégats en jet libre utilisant un réflectron.

Notre montage à réflectron permet d'étudier la fragmentation unimoléculaire des agrégats. Plusieurs méthodes ont été décrites dans la littérature dans ce but, mais elles nécessitent en général un grand nombre de spectres de masse, pour balayer la masse du parent et celle du fragment. Elles nécessitent en général aussi de sélectionner une masse de parents. Nous avons proposé une nouvelle méthode qui permet de déterminer tous les canaux de fragmentation pour tous les parents en même temps, avec environ une dizaine de balayages. Le principe est représenté sur la figure 1.

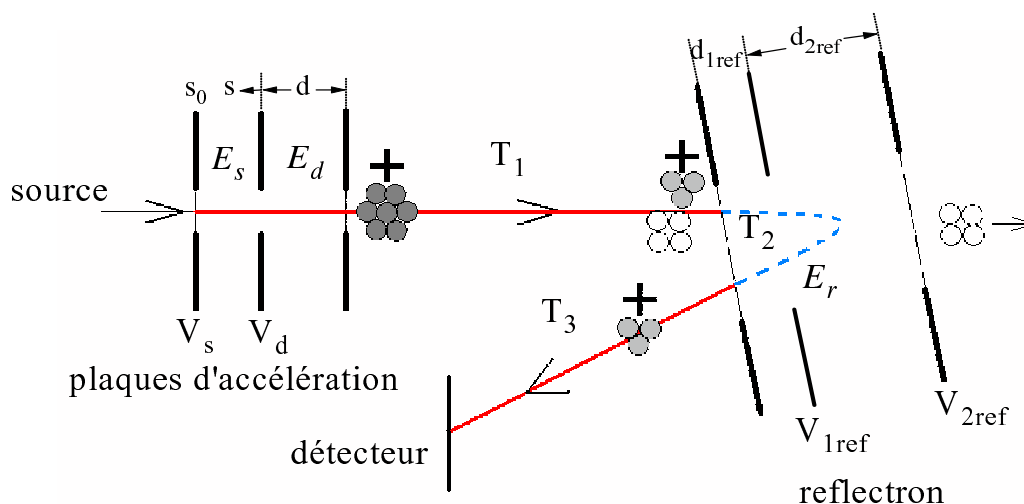


Figure 1 : Schéma du dispositif expérimental d'étude de la fragmentation

Dans les zones de vol libre, les parents d'une masse donnée et les fragments issus de ce parent vont à la même vitesse. C'est pourquoi il n'est pas possible de détecter une fragmentation dans un temps de vol en ligne. Toutefois, si un agrégat de masse  $M$  s'est fragmenté avant d'avoir atteint le réflectron, le fragment chargé (de masse  $m$ ) a une trajectoire différente pendant la réflexion. Si le champ est constant dans le réflectron, le temps de réflexion est proportionnel à la vitesse, qui est en  $M^{-1/2}$  et inversement proportionnel à l'accélération, qui est en  $V_{\text{ref}}/m$ , où  $V_{\text{ref}}$  est la tension appliquée au réflectron. On a donc un temps total d'arrivée sur le détecteur qui est de la forme

$$T = AM^{1/2} + Bm/(V_{\text{ref}}M^{1/2})$$

où  $A$  et  $B$  sont des constantes. On peut donc avoir accès à la fois à  $M$  et  $m$  en balayant  $V_{\text{ref}}$ . La résolution du dispositif permet de séparer les réactions faisant intervenir les deux isotopes naturels de l'argent ( $^{107}\text{Ag}$  et  $^{109}\text{Ag}$ ). Cette méthode a été appliquée aux agrégats de bromure d'argent. Cette technique, qui ne nécessite aucune modification physique du spectromètre de masse, permet de déterminer les voies de fragmentation sans aucune ambiguïté. À notre connaissance, c'est la seule méthode utilisant un réflectron qui lève totalement toute ambiguïté. Cette méthode, que nous avons également appliquée dans un but de vérification et de validation à des agrégats de type  $[\text{Ag}_n(\text{SF}_6)_p]^+$  (dans ces agrégats, les molécules  $\text{SF}_6$ , liées par des interactions de Van der Waals, se dissocient abondamment), a fait l'objet d'une publication [*Rev. Sci. Ins.*, 71, 2033 (2001)].

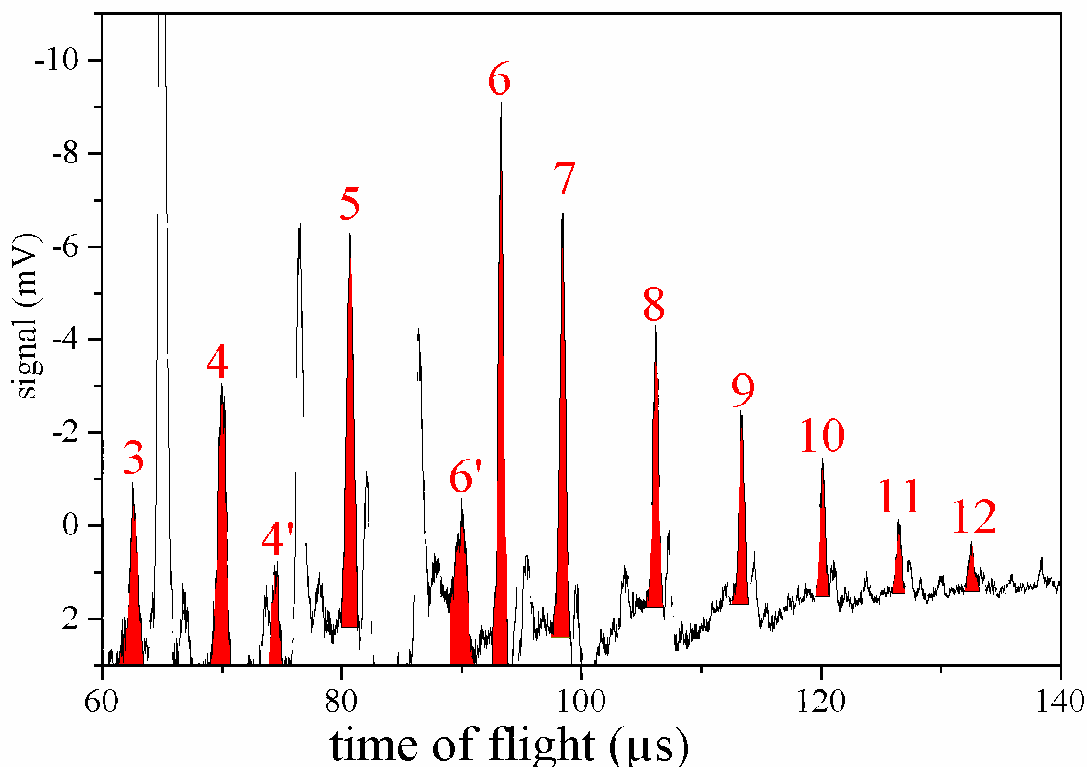


Figure 2 : Spectre de fragmentation d'agrégats d'AgBr

Cette étude de fragmentation a révélé un comportement insolite des agrégats  $\text{Ag}_n\text{Br}_{n-1}$  : à partir d'une certaine taille, ceux-ci se dissocient préférentiellement en  $\text{Ag}_3\text{Br}_3^+$  complémentaire chargé positivement. Sur la figure 2, les pics 4,5,6',7,8,9,10,11,12 proviennent de la fragmentation d'agrégats  $\text{Ag}_n\text{Br}_{n-1}^+$  en  $\text{Ag}_3\text{Br}_3$  et  $\text{Ag}_{n-3}\text{Br}_{n-4}^+$ , avec  $n$  variant de 4 à 12.  $\text{Ag}_6\text{Br}_5^+$  fait exception et se dissocie principalement en  $\text{AgBr}$  et  $\text{Ag}_5\text{Br}_4^+$  (pic n°6). Les pics n°3 et 4' correspondent à la perte d'un dimère  $\text{AgBr}$  par respectivement  $\text{Ag}_3\text{Br}_2^+$  et  $\text{Ag}_4\text{Br}_3^+$ . Ceci est inhabituel, les agrégats évaporant plutôt des monomères ou des dimères, beaucoup plus rarement des fragments plus gros.

Nous avons aujourd'hui, à l'issue d'une investigation théorique impliquant plusieurs niveaux d'approches en fonction de la taille des agrégats à étudier, réussi à modéliser les agrégats d'AgBr et à interpréter la plupart des résultats ci-dessus.

### 3.2.3.2. Théorie

Parallèlement aux expériences, nous avons mené une approche théorique du système AgBr sur plusieurs plans. D'une part, en collaboration avec F. Spiegelman (Laboratoire de Physique Quantique / IRSAMC, UMR 5626), nous utilisons les outils de la chimie quantique pour mener de lourds calculs *ab initio* aussi précis que possibles mais limités aux petits systèmes. D'autre part, nous avons construit un modèle électrostatique « amélioré » permettant de traiter éventuellement un électron excédentaire (par rapport à la stœchiométrie). Ce modèle, moins gourmand en temps de calcul, permet d'appréhender des tailles plus



importantes (jusqu'à 27 atomes dans les optimisations globales de type *Monte-Carlo* et près de 60 atomes dans la modélisation locale de défauts de surface).

### 3.2.3.2.1. calculs *ab initio* « préliminaires »

L'argent est un métal noble qui se comporte grossièrement comme un système à un électron (électron de valence  $5s$ ), mais son traitement est plus complexe que celle d'un alcalin à cause du traitement délicat des électrons de la couche  $4d$  (nous verrons même que les électrons  $4s$  et  $4p$  semblent avoir une influence non négligeable sur les agrégats d'AgBr).

Les calculs *ab initio* réalisés peuvent se diviser en plusieurs catégories en fonction du nombre d'électrons sur l'argent (on considère toujours 7 électrons sur le brome) pris en compte et de la technique utilisée. Pour simplifier, dans l'ordre croissant de tailles pouvant être considérées (c'est-à-dire par ordre décroissant de temps de calcul requis) : LCAO (*coupled clusters*) avec 19 électrons (limité au dimère), LCAO avec 11 électrons (jusqu'à 6 atomes en version perturbative *MP2*), fonctionnelle de la densité (DFT *B3LYP*) avec 11 électrons dans un premier temps, puis 19 électrons (jusqu'à 12 atomes). Ces calculs ne permettent pas, en raison du temps de calcul, d'explorer exhaustivement l'espace des configurations géométriques, mais autorisent cependant une relaxation locale. Pour les agrégats de plus de 4 atomes, la géométrie est donc simplement relaxée à partir d'une ou plusieurs configurations générées par une exploration plus exhaustive de type *Monte-Carlo* utilisant le modèle classique décrit au paragraphe suivant. Ces travaux ont fait l'objet d'une publication [*J. Chem. Phys.*, 111,8925 (1999)].

### 3.2.3.2.2. modèles classiques

Le modèle utilisé considère un système constitué d'ions  $\text{Ag}^+$  et  $\text{Br}^-$  liés par des potentiels de paires incluant :

- L'interaction coulombienne
- La répulsion des cœurs (Born Mayer)
- La corrélation des dipôles instantanés en  $1/R^6$  (interaction de type Van der Waals)
- Les dipôles induits par les charges (le calcul des dipôles et du champ électrique est autocohérent). À cause de la grande polarisabilité des ions en jeu (surtout  $\text{Br}^-$ ), le dipôle sur chaque centre est limité par une fonction de saturation.
- L'interaction entre ces dipôles induits.

Les paramètres de ce modèle sont ajustés de manière à reproduire les structures des calculs *ab initio* pour les petites tailles.

L'accord des structures données par ce modèle avec les calculs DFT à 11 électrons étant excellent, nous lui avons adjoint la possibilité de traiter les systèmes avec un électron excédentaire (par exemple  $\text{Ag}_n\text{Br}_{n-1}$  neutre), afin de pouvoir modéliser l'interaction d'atomes d'argent avec une surface d'AgBr. Cette technique s'apparente au modèle de Hückel. Pour une géométrie donnée, on calcule l'énergie de chaque configuration (une configuration correspond à la neutralisation d'un ion  $\text{Ag}^+$  particulier) en utilisant des potentiels de paires. Le couplage entre ces différentes configurations est donné par un terme d'énergie de saut (dépendant des distances), dérivé d'un calcul *ab initio* du dimère  $\text{Ag}_2^+$ . La matrice formée des énergies de chaque configuration sur la diagonale et de ces couplages comme termes extra-diagonaux est ensuite diagonalisée, donnant l'énergie de l'état fondamental et les coefficients électroniques correspondants (le « poids de l'électron » sur chaque ion d'argent). La structure est ensuite optimisée par une méthode *Monte-Carlo* associée à des trempes par gradient conjugué. En fait, il est plus efficace en temps de calcul d'inclure les coefficients électroniques dans les paramètres du gradient conjugué plutôt que de diagonaliser à chaque

géométrie. Bien que les structures intermédiaires « n'aient pas de sens » (ne correspondent pas à un état propre du système), la structure convergée est atteinte plus rapidement (et est évidemment la même que si on diagonalise). Cette méthode s'apparente un peu à celle de Car-Parinello développée dans le cadre de calculs quantiques. Les résultats obtenus sont là encore en excellent accord avec les résultats de calculs DFT à 11 électrons et les temps de calculs pas trop grevés.

Malgré ce succès apparent, nous n'étions pas satisfaits de ces résultats (DFT et classique) car en terme de bilans énergétiques, ils ne rendent pas compte des résultats expérimentaux (figure 2), à savoir la dissociation privilégiée en  $\text{Ag}_3\text{Br}_3$ . Nous avons imputé ce désaccord à l'influence de phénomènes dynamiques, entropiques ou de barrières de potentiel sur les voies de dissociation et avons donc entrepris de modéliser dynamiquement la dissociation. Le modèle classique a servi de base à ces calculs de dynamique de fragmentation. Un agrégat donné est porté à une certaine température, puis on le laisse évoluer librement (en résolvant les équations de la mécanique classique) pendant un certain temps. Il se dissocie alors (ou non). On répète le calcul un grand nombre de fois (à la même température) et on fait une statistique sur les fragments générés. Ce type de calcul tient compte des effets entropiques et des éventuelles barrières de potentiel sur les voies de dissociation. Malheureusement, les résultats obtenus ne sont toujours pas en accord avec résultats expérimentaux. Nous n'avons en effet noté aucune propension des systèmes à se dissocier préférentiellement en  $\text{Ag}_3\text{Br}_3$ . Le système se dissocie plutôt en monomères et en dimères.

#### *3.2.3.2.3. Calculs ab initio « définitifs »*

Nous avons entrepris dans un second temps des calculs de DFT plus précis avec 19 électrons sur chaque atome d'argent. Les structures fondamentales sont en général peu modifiées par rapport au calcul à 11 électrons, mais les énergies diffèrent parfois significativement, suffisamment pour modifier l'ordre de stabilité des isomères, et dans certains cas apparaît une structure inédite. En particulier la structure hexagonale (en fait presque triangulaire) de  $\text{Ag}_3\text{Br}_3$  est conservée mais devient beaucoup plus stable. Relativement, ces petits effets (quelques dixièmes d'eV) ont eu cependant un impact particulièrement bénéfique sur l'accord avec l'expérience puisque, dans la limite des tailles calculables, toutes les voies de dissociation observées expérimentalement sont maintenant les plus basses sur un critère purement énergétique. Ce calcul reproduit bien la singularité de  $\text{Ag}_6\text{Br}_5^+$  qui se dissocie en  $\text{AgBr}$  et non en  $\text{Ag}_3\text{Br}_3$  comme tous les autres.

parent	Fragment(s)	Taux exp.(%)	$D_n$ (eV)	Pic n°( fig.2)
$\text{Ag}_2\text{Br}^+$	$1,0^+ + 1,1$	0.15	2.095	
$\text{Ag}_3\text{Br}_2^+$	$2,1^+ + 1,1$	1.9	1.647	3
$\text{Ag}_4\text{Br}_3^+$	$1,0^+ + 3,3$	1.2	1.660	4
	$3,2^+ + 1,1$	1.5	1.783	4'
$\text{Ag}_5\text{Br}_4^+$	$2,1^+ + 3,3$	1.2	1.663	5
$\text{Ag}_6\text{Br}_5^+$	$5,4^+ + 1,1$	6.3	$\Delta^*$	6
	$3,2^+ + 3,3$	1.2	$\Delta+0.016$	6'
$\text{Ag}_7\text{Br}_6^+$	$4,3^+ + 3,3$	5.8		7
$\text{Ag}_8\text{Br}_7^+$	$5,4^+ + 3,3$	9.8		8
$\text{Ag}_9\text{Br}_8^+$	$6,5^+ + 3,3$	11.5		9
$\text{Ag}_{10}\text{Br}_9^+$	$7,6^+ + 3,3$	12.8		10
$\text{Ag}_{11}\text{Br}_{10}^+$	$8,7^+ + 3,3$	12		11

\* l'énergie de  $\text{Ag}_6\text{Br}_5^+$  n'est pas calculée. Il est cependant possible de calculer l'énergie des voies de dissociation à une constante  $\Delta$  près.

Table 1 : Voies de fragmentation expérimentales et calculées des agrégats  $\text{Ag}_n\text{Br}_{n-1}^+$ . Dans la deuxième colonne, les couples  $p, q$  se réfèrent aux agrégats  $\text{Ag}_p\text{Br}_q$ . La colonne « Taux exp. » est le taux de fragmentation expérimental.  $D_n$  est l'énergie de dissociation issue des calculs à 19 électrons. La dernière colonne renvoie à la numérotation des pics expérimentaux de la figure 2.

La différence entre le calcul à 11 électrons et le calcul à 19 électrons n'est pas encore entièrement comprise, mais il semble qu'interviennent des liaisons entre atomes d'argent résultant de l'interaction résonnante entre certaines orbitales  $4d$  de l'argent et  $4p$  du brome. Bien que les électrons  $4d$  soient pris en compte dans le calcul à 11 électrons, cet effet n'apparaîtrait pas à cause de différences d'énergie de ces orbitales  $4d$  relativement minimales induites par la perturbation des orbitales  $4s$  et/ou  $4p$  mais suffisantes pour annihiler la résonance. L'interprétation, surprenante, est que les ions  $\text{Ag}^+$  sont en fait partiellement liés entre eux non pas par leurs orbitales « de valence » de type  $s$ , mais par les orbitales  $d$  qui créent des liaisons de symétrie  $\Pi$  [*J. Chem. Phys.*, 114, 289(2001)].

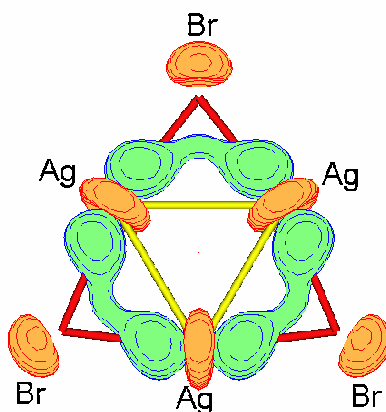


Figure 3 : une orbitale moléculaire liante de fort poids de  $(\text{AgBr})_3$ . Cette orbitale est un mélange d'orbitales  $4d$  de Ag et d'orbitales  $4p$  de Br. On note la liaison entre les atomes d'argent, fortement responsable de la grande stabilité de cet agrégat.

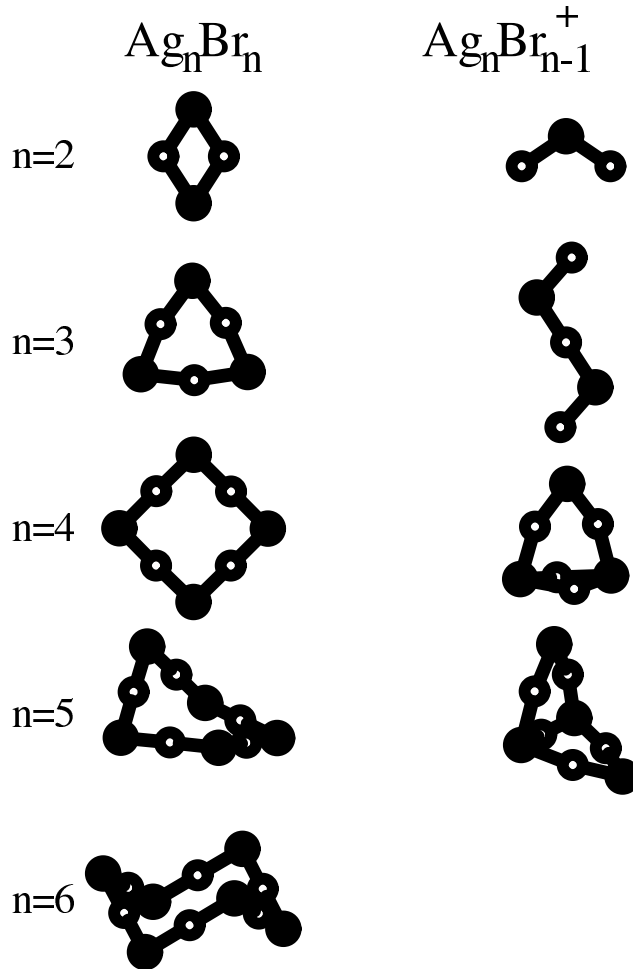
Un autre point intéressant, déjà présent dans les calculs DFT à 11 électrons, est que la voie privilégiée de dissociation des espèces  $\text{Ag}_n\text{Br}_n^+$  est l'éjection d'un atome neutre de brome. Ceci corrobore notre intuition que la formation des petits agrégats d'argent dans le

processus photographique pourrait résulter non pas d'un piégeage séquentiel de tous ses constituants (processus souvent admis à défaut d'une autre explication mais d'une probabilité infime), mais d'un piégeage d'un seul ou au plus de deux atomes d'argent, suivi de l'éjection de certains atomes de brome voisins. Cette intuition est aussi fondée sur les résultats d'une modélisation de la surface utilisant le potentiel classique qui a certes montré ses limites mais n'en est pas pour autant inintéressante.

### 3.2.3.3. Généralisation

La structure de quelques agrégats  $Ag_nBr_p$  est présentée sur la figure 4. Un résultat important saute aux yeux : la structure des agrégats stœchiométriques est quasiment plane, et cyclique, contrairement à ce qui se passe pour les agrégats d'halogénures d'alcalins, qui adoptent très tôt une structure tridimensionnelle. On peut penser que cette particularité, due à l'influence des électrons  $d$  de l'argent, est commune à tous les agrégats mixtes d'halogénures de métaux isoélectroniques à l'argent (Ag, Cu). Il devient alors possible d'interpréter les expériences de T.P. Martin [*J. Chem. Phys.*, 73, 3541 (1980), *J. Chem. Phys.*, 80, 3956 (1984)] dans lesquelles les mesures par spectroscopie Raman des fréquences de vibration de petits agrégats ( $M_{=Ag,Cu} X_{=Cl,Br}$ ) piégés en matrice étaient incompatibles avec leur structure tridimensionnelle supposée. Les structures cycliques que nous avons trouvées sont quant à elles parfaitement compatibles avec les fréquences mesurées. Moyennant la même hypothèse, on peut aussi comprendre la présence dans la vapeur de tous les composés de type ( $M_{=Ag,Cu} X_{=halogène}$ ) d'une forte proportion de trimères  $(MX)_3$  dont nous avons montré qu'il était une voie d'évaporation privilégiée des sels d'argent quasi stœchiométriques. Notons enfin que des expériences menées sur les hydroxydes d'argent révèlent le rôle important joué par les sous-structures  $(AgOH)_3$  [*C. Bréchnignac et al, Chem. Phys. Lett.*, 303, 304 (1999) ; *M. Bertolus et al, E.P.J. D*, 11, 387 (2000)].

L'ensemble de ce travail sur les agrégats de bromure d'argent a donné lieu à la thèse de Franck Rabilloud, soutenue en octobre 2000.

Figure 4 : structures de l'état fondamental de quelques agrégats  $\text{Ag}_n\text{Br}_p$ .

### 3.2.4. Collaborations

#### 3.2.4.1. Polarizabilité et susceptibilité diélectrique des agrégats $\text{Na}_n\text{F}_{n-1}$

Il s'agit d'une collaboration avec le groupe de Ph. Dugourd au LASIM (Lyon) et le groupe de F. Spiegelman au LPQT (Toulouse) dans le cadre du GDR « agrégats ». Comme nous avons acquis une grande connaissance des agrégats  $\text{Na}_n\text{F}_{n-1}$ , nous avons décidé de mesurer les polarisabilités de ces agrégats et de les corrélérer aux autres propriétés électroniques que nous connaissions. L'expérience a été réalisée sur le montage de Lyon. D'autre part, ces polarisabilités ont été calculées à Toulouse et à Lyon. A première vue, il y avait un désaccord important entre la théorie et l'expérience (écarts d'un facteur 5 à 10 entre valeurs mesurées et polarisabilités calculées). Pour comprendre ce qui n'allait pas, nous avons dû rentrer dans les détails de l'expérience lyonnaise.

##### 3.2.4.1.1. Susceptibilité et polarisabilité

Le principe de l'expérience lyonnaise utilise la déviation d'un objet présentant un dipôle dans un gradient de champ électrique. Les agrégats sont produits dans un jet collimaté, traversent la zone de gradient de champ et sont ensuite détectés par un système sensible à la position. Si le système n'a pas de dipôle permanent, le dipôle induit par le champ est dans la direction du champ et le système est dévié dans la direction du gradient proportionnellement à sa polarisabilité  $\alpha$ . Plus exactement, la déviation est proportionnelle à  $\alpha \nabla F^2 / 2$ , où  $F$  est le champ électrique. Si le système a un dipôle permanent, deux cas peuvent se présenter. (i) Le

dipôle est rigidement lié au système : dans ce cas, la projection du dipôle sur le champ est conservée et chaque agrégat est dévié proportionnellement à cette projection. Il n'y a pas de déviation en moyenne, mais un élargissement de la tache (la projection peut être positive ou négative). (ii) Le dipôle n'est pas rigidement lié au système et est libre de s'orienter par rapport au système (superpolarisabilité). Dans ce cas, il faut tenir compte des fluctuations thermiques et la déviation est proportionnelle à  $(p^2/3k_B T)(\nabla F^2/2)$ , où  $p$  est le dipôle permanent et  $T$  la température du système. Comme dans tous les cas on a une déviation de la forme  $\chi \nabla F^2/2$ , Il a été finalement décidé d'appeler susceptibilité de l'agrégat le coefficient de proportionnalité  $\chi$ , car c'est l'analogie de la susceptibilité d'orientation d'un matériau formé de molécules dipolaires.

#### 3.2.4.1.2. Agrégats de fluorure de sodium

Dans le cas des agrégats de fluorure de sodium, une bonne part du dipôle permanent provient de la répartition des charges dans le réseau cristallin. On pouvait donc penser que ce dipôle était rigidement lié au réseau et que la déviation moyenne serait liée à la polarisabilité de l'agrégat. Devant le désaccord flagrant entre théorie et expérience, F. Spiegelman a eu l'idée de comparer les susceptibilités mesurées aux valeurs de  $(p^2/3k_B T)$  calculées en prenant les dipôles théoriques. L'accord est alors excellent ! Reste à comprendre ce qui crée ce couplage entre dipôle et fluctuations thermiques, car tout de même le réseau d'un agrégat de sel est assez fortement rigide. Des calculs et des simulations sont en cours pour tenter de comprendre ce problème.

#### 3.2.4.2. « Ébullition » d'un agrégat de sodium

Il s'agit d'une collaboration avec le groupe de H. Haberland à Fribourg (Allemagne). Ce groupe a une magnifique expérience de calorimétrie des agrégats, permettant de mesurer les courbes caloriques d'agrégats sélectionnés en masse. Outre la transition solide-liquide des agrégats, ils ont été capables de mesurer la température associée à l'ébullition d'agrégats de 147 atomes de sodium. Or, comme chacun sait, la température d'ébullition dépend de la pression extérieure. Dans l'expérience, les agrégats sont sous vide, et cette pression est indéterminée. Suite à une discussion lors d'une école sur les transitions de phase des systèmes finis (Trente, septembre 2000), P. Labastie a fait deux séjours à Fribourg, afin de participer à l'élaboration d'un modèle permettant de convertir le taux d'évaporation en pression équivalente.

Ce modèle est le suivant : supposons que nous ayons, dans un volume fini (et petit), un agrégat de 147 atomes en équilibre avec sa vapeur. A l'échelle atomique, cet équilibre est dynamique, c'est-à-dire qu'il y a en permanence évaporation et collage d'atomes sur l'agrégat, avec un même taux pour l'évaporation que pour le collage. Dans l'expérience, le taux d'évaporation est connu : c'est l'inverse du temps entre la formation et la détection de l'agrégat. D'autre part, il est facile de calculer le taux de collage en fonction de la section efficace de collage et de la densité de la vapeur. En égalant les taux et en tenant compte de l'équation d'état de la vapeur, on peut en déduire une pression de vapeur équivalente au temps d'expérience. Ceci a fait l'objet d'une publication [*Phys. Rev. Lett.*, 87 (2001)].

Bien sûr, ce modèle a un défaut, qui est de comparer une situation d'équilibre supposé (l'équilibre entre un agrégat et sa vapeur existe-t-il ?) à une situation expérimentale qui elle, est manifestement hors d'équilibre. A-t-on dans ce cas le droit de supposer (ce que fait le modèle ci-dessus) une microréversibilité entre évaporation et collage ? L'expérience que nous sommes en train de monter à Toulouse a entre autres pour but de répondre à cette question (voir la partie projets).

### 3.3. Projets

#### 3.3.1. Nucléation d'agrégats

##### 3.3.1.1. Introduction

Un des phénomènes physiques les plus présents dans la vie de tous les jours, et ce depuis des temps immémoriaux, est sans doute celui de la fusion et de l'évaporation des corps simples. On en entend parler très tôt au cours de nos études, pour finir par le diagramme de phase des corps simples au cours des premières années d'université en thermodynamique classique. D'autre part, ces phénomènes de transitions du premier ordre sont caractéristiques de la matière macroscopique et ils doivent donc apparaître d'une manière ou d'une autre quand la taille des objets augmente puisqu'ils n'existent pas dans les atomes ou les molécules. Comment se manifeste l'apparition de ces propriétés dans la matière quand on augmente la taille des objets étudiés ? Quelle(s) propriété(s) de la surface de potentiel des corps simples permet(tent) d'expliquer cette transition ? Il n'y a à notre connaissance pas de réponse complète. D'une manière générale, l'étude de propriétés génériques des surfaces de potentiel de systèmes finis est d'une importance particulière, tant en ce qui concerne les nanostructures que les systèmes biologiques. Il est clair que le projet proposé est très fondamental par nature. Toutefois, les études dans le domaine nanométrique prennent une importance considérable dans la mesure où les nanotechnologies vont aborder ce domaine de taille. Par exemple, le fait que des petits objets puissent être liquides à une température très différente de celle de la matière macroscopique constituera sans doute un problème technologique majeur dans certains cas.

Depuis une quinzaine d'années, la transition solide–liquide dans les agrégats a été étudiée par des méthodes numériques. Dans bien des cas, des effets précurseurs de cette transition ont été « observés » pour des tailles inférieures à 10 atomes. Pour des tailles plus grosses, on a une transition très nette, quoique étalée sur un domaine de températures  $\Delta T$ , avec un effet non trivial d'équilibre « chimique » entre les phases solide et liquide. De nombreuses observations ont été faites (microscopie électronique, réflectivité) pour des tailles supérieures à 2 à 3 nm, et une confirmation éclatante des aspects thermodynamiques de cette transition a été obtenue par Haberland [*M. Schmidt, R. Kusche, W. Kronmüller, B. v. Issendorff, H. Haberland, Phys. Rev. Lett.* 79, 99 (1997)] sur des agrégats de sodium.

L'énergétique de la transition liquide– (ou solide–)gaz est quant à elle moins bien connue. On doit d'ailleurs avoir plusieurs régimes suivant que l'on évapore les atomes un par un, ou qu'il y a vaporisation quasi totale en une fois de l'agrégat. Bien sûr, l'évaporation unimoléculaire a été très étudiée, sans qu'il y ait accord quantitatif entre théorie et expérience [*S. Weerasinghe et F.G. Amar, J. Chem. Phys.* 98, 4967 (1993), *C. Bréchignac, Ph. Cahuzac, J. Leygnier, I. Tignères, Eur. Phys. J. D* 9, 421 (1999), *C. Bréchignac, Ph. Cahuzac, J. Leygnier, I. Tignères, Chem. Phys. Lett.* 303, 304 (1999)]. D'autre part, la fragmentation simultanée est l'objet d'expériences actuelles en physique nucléaire, mais la théorie est délicate à mettre en œuvre. En fait, la théorie de l'évaporation unimoléculaire est très ancienne [*L. S. Kassel, J. Phys. Chem.* 32, 1065 (1928)]. Elle fait appel à de trop nombreuses approximations pour être quantitative. Des théories plus récentes (espace de phase) peuvent sans doute être utilisées au prix d'efforts numériques conséquents et à condition d'avoir un modèle fiable des interactions dans l'agrégat. En fait, il serait intéressant de mesurer plutôt que de calculer les quantités intervenant dans cette théorie. Il y en a quatre qui ne peuvent être calculées que numériquement :

- Densité d'états du parent ;
- Densité d'états du fragment ;
- Taux d'évaporation ;

– Section efficace de collage (processus inverse de l'évaporation).

De fait, les deux premières quantités peuvent être obtenues par des expériences de nanocalorimétrie du même type que celles d'Haberland. Il existe plusieurs mesures de taux d'évaporation. Par contre, il y a eu très peu de mesures de taux de collage d'atomes sur des agrégats. C'est ce que nous nous proposons de faire dans le cadre de ce projet.

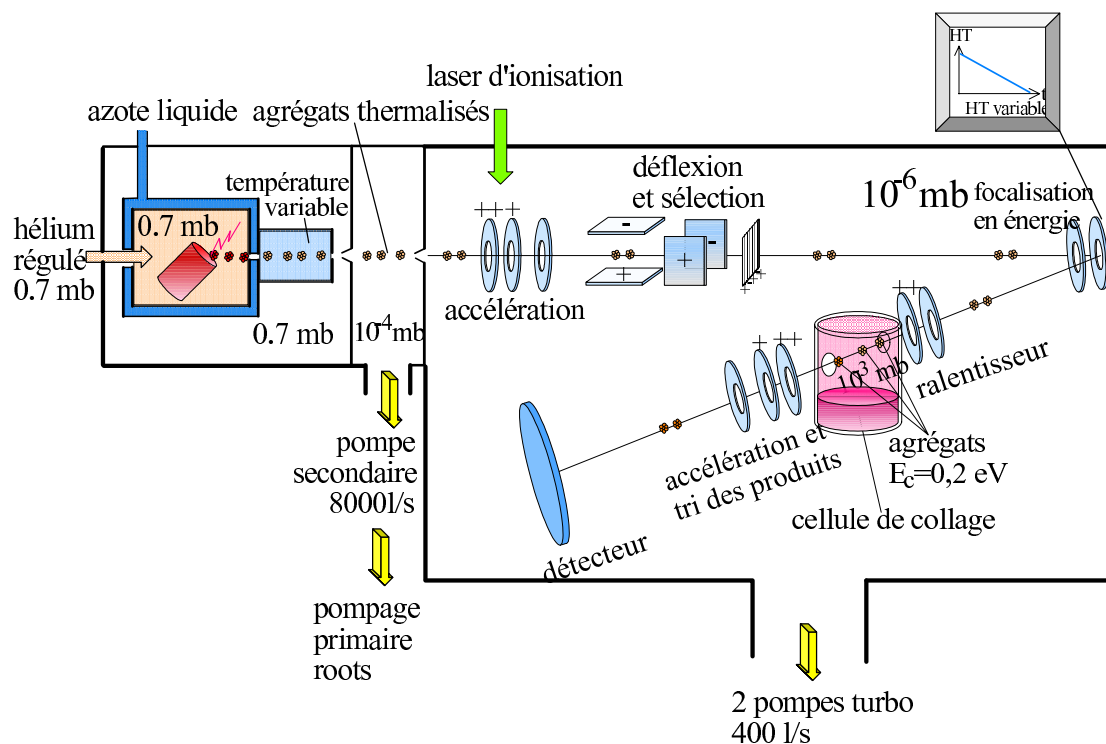


Figure 5 : schéma de principe de l'expérience

Nous devons pour cela disposer d'une source d'agrégats thermalisés. A cette fin, il faut faire passer les agrégats dans une cellule contenant un gaz tampon thermostaté. Ceci n'est possible de manière précise qu'en continu. De plus, il est nécessaire d'avoir une source continue si l'on veut travailler avec les lasers femtosecondes de l'équipe de B. Girard sans trop perdre en rapport cyclique. Nous avons en effet un projet en commun avec cette équipe, qui démarrera avec notre source pulsée actuelle, mais sera sans doute beaucoup plus aisé en continu. Nous proposons donc de construire une nouvelle source continue à agrégation gazeuse suivie d'une cellule contenant un gaz thermostaté. En générant de plus une décharge à cathode creuse dans la source, il sera possible de produire des agrégats ionisés à température déterminée.

L'étude du collage est prévue en faisant passer à très faible vitesse des agrégats sélectionnés en masse dans une cellule contenant les monomères sous basse pression.

### 3.3.1.2. Présentation de la nouvelle source

Le schéma général de l'expérience est donné sur la figure 5. Le principe de la source est bien connu. En plus de l'agrégation gazeuse qui a lieu dans la chambre refroidie à l'azote liquide, il est prévu de réaliser une décharge dans la zone du creuset, ce qui permettra d'obtenir des agrégats déjà ionisés en nombre conséquent et dans une gamme de taille assez



étendue. D'autre part, ce type de source permet d'obtenir des agrégats de métaux purs beaucoup plus facilement que les sources à vaporisation laser. Dans le cadre d'une collaboration avec l'équipe de H. Haberland (déjà concrétisée par une publication commune), nous pensons pouvoir disposer des conseils des membres de cette équipe qui ont déjà construit plusieurs sources du même type. Dans un premier temps, l'élément de thermalisation serait prévu pour des températures variant de 77 K à quelques centaines de degrés Celsius.

### 3.3.1.3. Collage d'atomes sur des agrégats

Le principe de l'expérience est donné sur la figure 5. On commence par sélectionner les agrégats thermalisés d'une masse donnée par un temps de vol direct. Il faut ensuite les « focaliser en énergie », c'est-à-dire produire un faisceau d'ions d'énergie cinétique très bien définie (à 1/10 d'eV près). Sur le schéma, cette tâche est confiée à un réflecteur électrostatique dont la tension varie linéairement en décroissant au cours du temps. Ce dispositif est efficace en théorie mais très sensible aux incertitudes sur les paramètres expérimentaux (temps, tensions). Dans le dispositif finalement retenu, les ions se propagent linéairement, ils ne sont plus réfléchis (la figure 5 reste toujours valable à condition de « déplier » la trajectoire des ions, la cellule de collage étant maintenant sur l'axe du faisceau d'ions incidents). Ils sont toujours focalisés en énergie lors de la traversée d'une zone définie par deux plaques, comme sur le schéma, dans laquelle le champ électrique est commuté cette fois-ci instantanément (quelques ns) de  $0 \text{ Vm}^{-1}$  à une valeur *ad hoc* lorsque l'agrégat de taille choisie pénètre entre les plaques. En théorie, ce dispositif est aussi performant que le précédent, mais beaucoup moins sensibles aux incertitudes expérimentales. Après cette focalisation, les agrégats sont ralentis à une énergie presque nulle que l'on peut choisir, et traversent une cellule contenant la vapeur atomique. Le ralentisseur est constitué d'une série de plaques qui génèrent un champ électrique décroissant exponentiellement, ceci afin de ne pas défocaliser spatialement le faisceau. Les agrégats traversent ensuite, à basse énergie, la cellule de collage qui contient une vapeur de sodium atomique (typiquement 600K,  $10^{-3}$ mb). C'est à ce stade que doit s'effectuer le collage d'un atome de la vapeur sur l'agrégat incident de taille  $n$  pour produire l'agrégat « produit » de taille  $n+1$ . Les agrégats sont ensuite réaccélérés pour un deuxième temps de vol permettant d'analyser les nouvelles masses produites.

Cette nouvelle configuration permettra aussi de mesurer des taux de fragmentation. On envisage à plus long terme la construction d'un piège ionique pour mesurer de longues durées de vie. Enfin, il sera aussi possible de chauffer les agrégats avec un laser dans la zone où ils se déplacent lentement, et de réaliser des expériences de nanocalorimétrie.

Ce projet a été financé sous forme d'actions spécifiques par le CNRS et l'Université. L'étude « théorique » de l'expérience est aujourd'hui quasiment achevée et nous avons déjà reçu une partie du matériel nécessaire à sa réalisation. Le montage débutera en janvier 2002.

### 3.3.1.4. Aspect théorique

Nous travaillons en étroite contact avec l'équipe théorique de F. Spiegelman du Laboratoire de physique quantique (UMR 5626). Cette équipe est constituée de chimistes théoriciens (F. Spiegelman, M.-C. Heitz, G. Durand) et vient de recruter un spécialiste de thermodynamique des systèmes finis (F. Calvo). Elle a pour projet de construire des modèles de nanostructures dans divers environnements. Il est indispensable de valider ces modèles par des expériences. En faisant nos mesures sur des agrégats libres, nous gardons une possibilité d'analyse très fine par rapport aux expériences en matrice ou sur des surfaces (en particulier de par la maîtrise de la taille des agrégats étudiés), permettant une comparaison détaillée avec

les modèles. Une fois validés, ces derniers peuvent ensuite être transposés à des situations plus compliquées où les expériences sont plus difficiles à analyser.

### 3.3.2. Dynamique femtoseconde d'agrégats de fluorure de sodium

Les études de dynamique d'agrégats de taille raisonnable (plus gros que le trimère) sont encore très peu nombreuses. En septembre 2001, nous avons commencé, en collaboration avec l'équipe « femtoseconde » du laboratoire CAR, une étude expérimentale de la dynamique des agrégats de fluorure de sodium à l'échelle femtoseconde. Nous envisageons dans un premier temps, en relation avec nos études antérieures de ces systèmes, d'observer la dynamique de fragmentation d'agrégats  $\text{Na}_n\text{F}_{n-1}$ . Nos études de spectroscopie « nanoseconde » par photodépopulation ont en effet révélé que certains de ceux-ci (de type « queue de sodium ») présentent des bandes d'absorption dissociatives. Les études théoriques portant sur la dissociation de  $\text{Na}_5\text{F}_4$  ont montré que les voies de dissociation suivies ne sont pas celles de plus basse énergie (qui impliquent l'évaporation d'un monomère métallique), mais correspondent à la dissociation d'un dimère  $\text{NaF}$ . Ce comportement résulte des propriétés de symétrie de l'état excité. Ceci n'a cependant pas pu être prouvé expérimentalement par les techniques laser classiques. L'exploration de la dynamique de dissociation est possible en utilisant un laser femtoseconde et la technique pompe-sonde : un premier pulse excite l'agrégat (par exemple  $\text{Na}_5\text{F}_4$ ) dans l'état dissociatif, un second sonde (par photoionisation) le produit de dissociation ( $\text{Na}_4\text{F}_3$  dans l'exemple choisi). Nous mesurerons ainsi, en fonction de l'agrégat initial, le temps caractéristique d'apparition du produit. De plus, la structure temporelle du signal de sonde nous renseignera sur la dynamique interne de l'agrégat dans l'état excité. Les problèmes de synchronisation temporelle entre notre expérience et le laser femtoseconde sont d'ores et déjà résolus et des mesures préliminaires ont déjà été effectuées : nous sommes capables de détecter dans notre spectromètre de masse  $\text{Na}_4\text{F}_3$  ionisé par laser femtoseconde. Les mesures sur  $\text{Na}_5\text{F}_4$  doivent être réalisées très prochainement. Le signal attendu étant faible, nous avons trouvé une solution afin de travailler sur fond noir, c'est-à-dire d'éliminer tous les agrégats  $\text{Na}_4\text{F}_3$  ne résultant pas de la dissociation de  $\text{Na}_5\text{F}_4$ . Il suffit pour ce faire d'envoyer quelques temps avant le pulse d'excitation femtoseconde un pré-pulse dit de « nettoyage ». Ce pré-pulse, de 10ns, est généré par notre laser excimère, à 308 nm. À cette longueur d'onde,  $\text{Na}_4\text{F}_3$  est ionisé, mais pas  $\text{Na}_5\text{F}_4$  (son potentiel d'ionisation est supérieur). Les agrégats  $\text{Na}_4\text{F}_3^+$ , produits dans le champ électrique du spectromètre de masse, sont donc éjectés hors de la zone d'ionisation tandis que les espèces  $\text{Na}_5\text{F}_4$  ne sont pas affectées. On peut ensuite réaliser les excitations femtoseconde dans un environnement débarrassé de  $\text{Na}_4\text{F}_3$ .

Un second volet de ces études consistera à réaliser des expériences dites « pump-dump » sur de petits agrégats de fluorure de sodium, qui ont été proposées par V. Koutecký [*J. Chem. Phys.*, 114, 2106 (2001)]. Afin de comprendre ce que nous proposons d'observer, prenons l'exemple de  $\text{Na}_2\text{F}$ . Cet agrégat est plié dans son état fondamental, linéaire dans le premier état excité. Après excitation laser dans cet état, il est par conséquent animé d'un mouvement périodique de pliage. Imaginons qu'un premier laser, femtoseconde, excite  $\text{Na}_2\text{F}$ , et un second, nanoseconde, l'ionise à partir de cet état excité. En l'absence d'autre perturbation, on observera un signal d'ionisation résonante à deux photons (R2PI). Si maintenant on envoie un second pulse femtoseconde après le premier avec un délai variable,  $\text{Na}_2\text{F}$  excité sera désexcité de façon stimulée vers l'état fondamental avec une efficacité périodique (de même période que celle du mode de pliage) pour des raisons de symétrie : la désexcitation est plus efficace lorsque l'état excité a la même géométrie que l'état fondamental. Le signal de R2PI sera donc modulé à cette fréquence, et on pourra observer en temps réel le « battement d'aile » de  $\text{Na}_2\text{F}$ .

### 3.4. Publications de l'équipe

#### 3.4.1. Publications dans des revues à comité de lecture

1998

- 1) « Melting and phase space transitions in small ionic clusters » F. Calvo, P. Labastie, J. Phys. Chem. B 102, 2051 (1998)
- 2) « Spectral Signature and Metallization of Alkali-Halide Clusters » P. Labastie, J. M. L'Hermite, P. Poncharal, G. Durand et F. Spiegelman, Zeitschrift-fur-Physikalische-chemie 203, 15-36 (1998).
- 3) « Chaos and dynamical coexistence in Lennard-Jones clusters » F. Calvo, J. Chem. Phys. 108, 6861 (1998)
- 4) « Monte-Carlo simulation of rotating clusters » F. Calvo, P. Labastie, Eur. Phys. J. D 3, 229 (1998)
- 5) « Free-energy calculation for rotating systems using the Monte-Carlo method » F. Calvo, Chem. Phys. Lett. 291, 393 (1998)
- 6) « The largest Lyapunov exponent in molecular clusters. Linear molecules and application to nitrogen clusters » F. Calvo, Phys. Rev. E 58, 5643 (1998)

1999

- 7) « Geometric size effects in the melting of sodium clusters » F. Calvo, F. Spiegelman, Phys. Rev. Lett. 82, 2270 (1999)
- 8) « The Cs(6D3/2)+H2 ->CsH+H reaction : Rotationally resolved total cross sections » V. Cavero, J.-M. L'Hermite, G. Rahmat, R. Vetter, J. Chem. Phys. 110, 3428-3436 (1999)
- 9) «One-electron pseudopotential study of Na<sub>n</sub>F<sub>n-1</sub> clusters (2 ≤ n ≤ 29). II. Absorption spectra, spectral signature, and classification» G. Durand, F. Spiegelmann, P. Poncharal, P. Labastie, J.-M. L'Hermite, M. Sence, J. Chem. Phys. 110, 7884-7892 (1999)
- 10) « Ab initio calculations of structural and electronic properties of small silver bromide clusters » F. Rabilloud, F. Spiegelmann, J.-L. Heully, J. Chem. Phys. 111, 8925-8933 (1999)
- 11) « Structure of nitrogen molecular clusters (N<sub>2</sub>)<sub>n</sub>, 13<n<55 » F. Calvo, A. Boutin, P. Labastie, Eur. Phys. D 9, 183 (1999)

2000

- 12) « A new method to study metastable fragmentation of clusters using a reflectron time-of-flight mass spectrometer» J.-M. L'Hermite, L. Marcou, F. Rabilloud, P. Labastie, Rev. Sci. Ins. 71, 2033-2037 (2000)
- 13) « Evidence for N<sup>1/3</sup> dependence of the sticking cross section of atoms on Van der Waals clusters » J. Vigué, P. Labastie, F. Calvo, Eur. Phys. J. D 8, 265-272 (2000)

- 14) « Structure of nitrogen molecular clusters  $(N_2)_n$ ,  $13 < n < 55$  » F. Calvo, A. Boutin, P. Labastie, *Eur. Phys. J. D* **9**, 183 (1999)
- 15) « Quantum chemical calculations for the Dissociative Recombination of  $HCN^+$  and  $HNC^+$  » D. Talbi, A. Le Padellec, J.B.A Mitchell, *J. Phys. B* **33**, 3631 (2000)
- 16) « Resonant ion pair formation in electron collisions with  $HD^+$  and  $OH^+$  » A. Larson, N. Djuric, W. Zong, C.H. Green, A.E. Orel, A. Al-Khalili, A.M. Derkatch, A. Le Padellec, A. Neau, S. Rosén, W. Shi, L. Viktor, H. Danared, M. af Ugglas, M. Larsson and G.H. Dunn, *Phys. Rev. A* **62**, 042707 (2000).

2001

- 17) « Electron impact single detachment on the  $F^-$  ions using the heavy ion storage ring CRYRING: cross section determination » K. Andersson, D. Hanstorp, Aneau, S. Rosen, H. T. Schmidt, R. Thomas, M. Larsson, J. Semaniak, F. OsterDahl, H. Danared, A. Kallberg, A. Le Padellec, *Eur. Phys. J. D* **13**, 323–238 (2001)
- 18) « Resonant ion-pair formation and dissociative recombination in electron collisions with ground-state  $HF^+$  ions » A. Larson, N. Djuric, W. Zong, C.H. Green, A.E. Orel, A. Al-Khalili, A.M. Derkatch, A. Le Padellec, A. Neau, S. Rosén, W. Shi, L. Viktor, H. Danared, M. af Ugglas, M. Larsson, G.H. Dunn, *Phys. Rev. A* **64**, 022713/1–9 (2001)
- 19) « *Ab initio* study of silver bromide  $Ag_nBr_p^+$  clusters ( $n \leq 6$ ,  $p=n, n-1$ ) » F. Rabilloud, F. Spiegelmann, J.-M. L’Hermite, P. Labastie, *J. Chem. Phys.* **114**, 289–305 (2001)
- 20) « Electron-Impact Detachment and Dissociation of  $C_4^-$  Ions » A. Le Padellec, D. Pegg, F. Rabilloud, A. Neau, F. Hellberg, R. Thomas, H.T. Schmidt, M. Larsson, K. Andersson, H. Danared, A. Källberg, D. Hanstorp, *J. Chem. Phys.* **115**, 10671–7 (2001)
- 21) « Electron scattering on  $CN^-$  » A. Le Padellec, K. Andersson, D. Hanstorp, F. Hellberg, M. Larsson, A. Neau, S. Rosén, H.T. Schmidt, R. Thomas, J. Semaniak, D. J. Pegg, F. Österdahl, H. Danared, A. Källberg, *Phys. Scripta* **64**, 467–73 (2001)
- 22) « Resonant ion pair formation in the recombination of  $NO^+$  with electrons: cross section determination » A. Le Padellec, N. Djuric, A. Al-Khalili, H. Danared, A.M. Derkatch, A. Neau, D.B. Popovic, S. Rosén, J. Semaniak, R. Thomas, M. af Ugglas, W. Zong, M. Larsson, *Phys. Rev. A* **64**, 012702/1–7 (2001)
- 23) « Metastable fragmentation of silver bromide clusters » J.-M. L’Hermite, F. Rabilloud, L. Marcou, P. Labastie, *Eur. Phys. J. D* **14**, 323–30 (2001)
- 24) « Evidence for trimers evaporation in silver bromide clusters » J.-M. L’Hermite, F. Rabilloud, P. Labastie, F. Spiegelman, *Eur. Phys. J. D* **16**, 77–80 (2001)
- 25) « Caloric curve across the liquid-to-gas change for sodium clusters » M. Schmidt, T. Hippler, J. Donges, W. Kronmuller, B. von Issendorf, H. Haberland, P. Labastie, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 203402/1–4 (2001)

### 3.4.2. Conférences invitées

- 1) 6<sup>th</sup> EPS conference on Atomic and Molecular Physics ECAMP, Ph. Poncharal, J.-M. L’Hermite, I. Reiche, F. Spiegelman, G. Durand, M. Sence, P. Labastie, Conférence invitée (Siena 14–18 juillet 1998, Italie)

- 2) Workshop « Atomic clusters, INT », P. Labastie, F. Calvo, « Several ways to compute the density of states for clusters », conférence invitée (Seattle août 1998)
- 3) TAMC III, F.Rabilloud, F.Spiegelmann, P.Labastie et J.-M L’Hermite, intervention orale invitée et poster (Berlin, 5-9 octobre 1999)
- 4) Gordon Conference on Molecular and Ionic Clusters MIC2000, F. Spiegelmann, F.Rabilloud, P. Labastie et J.-M L’Hermite, intervention orale invitée et poster (Toulouse, 16 avril 2000)
- 5) International Workshop on Phase transitions in finite systems, ECT\*, P. Labastie, conférence invitée (Trento, septembre 2000)
- 6) International Symposium on the Dissociative Recombination of Molecules with Electrons: Theory, Experiment, and Applications, A. Le Padellec, « Electron collision studies on  $CN^+$ ,  $HCN^+/HNC^+$ ,  $CN^-$  and  $C_4^-$  », conférence invitée (Chicago 26-30 août 2001)

### 3.4.3 Communications à des congrès avec actes

- 1) « The metastable fragmentation of silver bromide clusters », F. Rabilloud, A. Le Padellec, P. Labastie, J.-M. L’Hermite and F. Spiegelmann, Proceedings du « Symposium Nobel 2000 » en physique des agrégats – Visby – Goteland – 27 juin–2 juillet 2000 – World Scientific, Éditeurs : E Campbell et M Larsson
- 2) « Electron collision studies on  $CN^+$ ,  $CN^-$  and  $HCN^+/HNC^+$  », A. Le Padellec, Proceedings du « International Symposium on the Dissociative Recombination of Molecules with Electrons: Theory, Experiment, and Applications » – Chicago – Illinois, 26–30 Août 2001
- 3) “Merged beam studies of the associative ionization process”, A. Le Padellec, X. Urbain, T. Nzeyimana, E.A. Naji, Proceedings du « International Symposium on the Dissociative Recombination of Molecules with Electrons: Theory, Experiment, and Applications » – Chicago – Illinois, 26–30 Août 2001
- 4) « Electron collisions on  $C_4^-$  : detachment process and resonant structure », A. Le Padellec, F. Rabilloud, D. Pegg, K. Andersson, D. Hanstorp, A. Neau, M. Larsson, F. Hellberg and R. Thomas, Proceedings du « International Symposium on the Dissociative Recombination of Molecules with Electrons: Theory, Experiment, and Applications » – Chicago – Illinois, 26–30 Août 2001
- 5) « Electron scattering on negative ions in a storage ring », A. Neau, S. Rosen, H. Schmidt, J. Semaniak, R. Thomas, F. Hellberg, M. Larsson, A. Le Padellec and D.J. Pegg, Proceedings de « ICPEAC 2001 - XXII International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions » - Santa Fe - New Mexico, 18–24 Juillet 2001

Publications de membres de l'équipe décrivant des travaux faits à l'extérieur du laboratoire

Arnaud LE PADELLEC

Articles publiés dans des journaux avec comité de lecture

1998

- “ Dissociative recombination and excitation of  $\text{CH}_5^+$ : absolute cross sections and branching fractions ” *J. Semaniak, Å. Larson, A. Le Padellec, C. Strömholm, M. Larsson, S. Rosén, R. Peverall, H. Danared, N. Djuric, G.H. Dunn and S. Datz*, *Astrophys. J.*, **498**(2)Part1, 886, (1998).
- “ Dissociative recombination and excitation of  $\text{CH}_2^+$  ” *Å Larson, A Le Padellec, J Semaniak, C. Strömholm, M. Larsson, S. Rosén, R. Peverall, H. Danared, N. Djuric, G.H. Dunn and S Datz*, *Astrophys. J.*, **505**, 459, (1998).
- “ Dissociative recombination of  $^3\text{HeH}^+$  : comparison of spectra obtained with 100, 10 and 1meV temperature electron beams ” *A. Al-Khalili, H. Danared, M. Larsson, A Le Padellec, R. Peverall, S. Rosén, J. Semaniak, M. af Ugglas, L. Vikor and W.J. van der Zande*, *Hyper. Inter.*, **114**, 281, (1998).
- “ Dissociative recombination and excitation of  $\text{N}_2^+$  : cross sections and product branching ratios” *J.R. Peterson, A Le Padellec, H. Danared, G.H. Dunn, M. Larsson, A. Larson, R. Peverall, C. Strömholm, S. Rosén, M. af Ugglas and W.J. van der Zande*. *J. Chem. Phys.*, **108**, 1978, (1998).
- “ The dissociative recombination of  $\text{CN}^+$  ” *A. Le Padellec, C. Sheehan and J.B.A. Mitchell*, *J. Phys. B*, **31**, 1725, (1998).
- “ New FALP-MS Measurements of  $\text{H}_3^+$ ,  $\text{D}_3^+$  and  $\text{HCO}^+$  Dissociative Recombination ” *S. Laubé, A. Le Padellec, O. Sidko, C. Rebrion-Rowe, J.B.A. Mitchell and B. R. Rowe*, *J. Phys. B*, **31**, 2111, (1998).
- “ Absolute cross sections and final state distributions for Dissociative Recombination and Excitation of  $\text{CO}^+(v=0)$  using an ion storage ring ” *S. Rosén, R. Peverall, M. Larsson, A. Le Padellec, J. Semaniak, Å. Larson, C. Strömholm, W. Van der Zande, H. Danared and G.H. Dunn*, *Phys. Rev. A*, **57**, 4462, (1998).
- “ A Storage Ring study of the dissociative excitation and recombination of  $\text{D}_3^+$  ” *A Le Padellec, M. Larsson, H. Danared, A. Larson, J.R. Peterson, S. Rosén, J. Semaniak and C. Strömholm*, *Phys. Scripta*, **57**(2), 215, (1998).

1999

- “ Branching fractions in dissociative recombination of the  $\text{NH}_4^+$  and  $\text{NH}_2^+$  molecular ions ”, *L. Vikor, A. Al-Khalili, H. Danared, N. Djuric, G.H. Dunn, M. Larsson, A. Le Padellec, S. Rosén and M. af Ugglas*, *Astron. Astrophys.*, **344**(3), 1027, (1999).
- “ Storage ring measurements of the dissociative recombination and excitation of the cyanogen ion  $\text{CN}^+$  ( $X^1\Sigma^+$  and  $A^3\Pi$ ,  $v=0$ ) ” *A Le Padellec, J.B.A. Mitchell, A. Al-Khalili, H. Danared, A. Källberg, Å. Larson, S. Rosén, M. af Ugglas, L. Vikor and M. Larsson*, *J. Chem. Phys.*, **110**(2), 890, (1999).
- “ Merged beam measurement of the Dissociative Recombination of  $\text{HCN}^+$  and  $\text{HNC}^+$  ” *C. Sheehan, A. Le Padellec, W.N. Lennard, D. Talbi and J.B.A. Mitchell*, *J. Phys. B*, **32**, 3347, (1999).

“ Resonant ion pair formation in electron collisions with ground state molecular ions “  
W. Zong, G. H. Dunn, N. Djuric, M. Larsson, A. Al-Khalili, A. Neau, A. M. Derkatch,  
L. Viktor, W. Shi, A. Le Padellec, S. Rosén, H. Danared, and M. af Ugglas, Phys. Rev.  
Lett., **83**, 951, (1999).

2000

“ Recombination of Simple Molecular Ions Studied in Storage Ring – Dissociative  
Recombination of  $\text{H}_2\text{O}^+$  ”, S Rosén, A. Derkatch, J. Semaniak, A. Neau, A. Al-Khalili,  
A. Le Padellec, L. Viktor, H. Danared, M. af Ugglas, R. Thomas and M. Larsson,  
Faraday, Discussion of the Chemical Society, 115, 295-302 (2000)

“ Dissociative Recombination of  $\text{D}_3\text{O}^+$  and  $\text{H}_3\text{O}^+$  : absolute cross sections and branching  
ratios ” A. Neau, A. Al-Khalili, S. Rosén, J. Semaniak, A. Le Padellec, A. M Derkatch,  
W. Shi, L Viktor, M. Larsson, R. Thomas, M. Nagard, K. Andersson, H. Danared and  
M. af Ugglas. , Journal of Chemical Physics, 113, 1762-70 (2000)

2001

“ Dissociative Recombination and Excitation of  $\text{O}_2^+$  : Cross Sections, Product Yields and  
Implications for studies of ionospheric airglows ” R. Peverall, S. Rosén, J.R. Peterson,  
M. Larsson, A. Al-Khalili, L. Viktor, J. Semaniak, R. Bobbenkamp, A. Le Padellec, and  
W.J van der Zande, Journal of Chemical Physics, 115, 5477-84 (2001)

## 10. Publications de l'ensemble du laboratoire

### 10.1. Publications dans des revues avec comité de lecture

1998

- [P1] A. Al Khalili, H. Danared, M. Larsson, A. Le Padellec, R. Peverall, S. Rosen, J. Semaniak, M. Ugglas, L. Viktor et W. J. van der Zande, "Dissociative recombination of  $^3\text{HeH}^+$ : comparison of spectra obtained with 100, 10 and 1 meV temperature electron beams," *Hyperfine Interactions* 114, 281-7 (1998).
- [P2] B. Arezki, Y. Boudouma, P. Benoit-Cattin, A. C. Chami, C. Benazeth, K. Khalal et M. Boundjema, "Angular, energy and charge distribution in the scattering of low-energy helium ions by an amorphous silicon surface," *Journal of Physics: Condensed Matter* 10, 741-52 (1998).
- [P3] D. Bakalov, F. Brandi, G. Cantatore, G. Carugno, S. Carusotto, F. Della Valle, A. De Riva, U. Gastaldi, E. Iacopini, P. Micossi, E. Milotti, R. Onofrio, R. Pengo, F. Perrone, G. Petrucci, E. Polacco, C. Rizzo, G. Ruoso, E. Zavattini et G. Zavattini, "The measurement of vacuum polarization: the PVLAS experiment," *Hyperfine Interactions* 114, 103-13 (1998).
- [P4] D. Bakalov, F. Brandi, G. Cantatore, G. Carugno, S. Carusotto, F. Della Valle, A. M. De Riva, U. Gastaldi, E. Iacopini, P. Micossi, E. Milotti, R. Onofrio, R. Pengo, F. Perrone, G. Petrucci, E. Polacco, C. Rizzo, G. Ruoso, E. Zavattini et G. Zavattini, "Experimental method to detect the magnetic birefringence of vacuum," *Quantum and Semiclassical Optics* 10, 239-50 (1998).
- [P5] A. Bastida, J. Zuñiga, A. Requena, N. Halberstadt et A. Beswick, "Vibrational Predissociation of the  $\text{I}_2\cdots\text{Ne}_2$  cluster: A Molecular Dynamics with Quantum Transitions Study," *J Chem Phys* 109, 6320-28 (1998).
- [P6] G. Bazalgette, R. White, G. Trenec, E. Audouard, M. Buchner et J. Vigué, "Photodissociation of ICl molecule oriented by an intense electric field : experiment and theoretical analysis," *J. Phys. Chem. A* 102, 1098-105 (1998).
- [P7] J. A. Beswick et O. S. Vasyuntinskii, "Long -range interatomic interactions studied through polarized photofragments techniques," *Comments on Atomic and Molecular Physics* 42, 69 (1998).
- [P8] V. Blanchet, M. A. Bouchene et B. Girard, "Temporal coherent control in the photoionization of  $\text{Cs}_2$  : Theory and Experiment," *Journal of Chemical Physics* 108, 4862-76 (1998).
- [P9] V. Blanchet et A. Stolow, "Nonadiabatic dynamics in polyatomic systems studied by femtosecond time-resolved photoelectron spectroscopy," *Journal of Chemical Physics* 108, 4371-74 (1998).
- [P10] C. Boisseau, E. Audouard et J. Vigué, "Quantization of the highest levels in a molecular potential," *Europhysics Letters* 41, 349-54 (1998).
- [P11] M. A. Bouchene, V. Blanchet, C. Nicole, N. Melikechi, B. Girard, H. Ruppe, S. Rutz, E. Schreiber et L. Wöste, "Temporal coherent control from wave packet interferences in one-and two-photon atomic transitions," *European Physical Journal D* 2, 131-41 (1998).



- [P12] B. Bourguignon, S. Carrez, M. Buchner et C. R. Henry, "Laser desorption of C-contaminated Pd clusters grown on MgO(100)," *Chemical Physics Letters* 287, 40-6 (1998).
- [P13] F. Brandi, E. Della Valle, P. Micossi, A. M. De Riva, G. Zavattini, E. Perrone, C. Rizzo et G. Ruoso, "Cotton-Mouton effect of molecular oxygen: a novel measurement," *Journal of the Optical Society of America B (Optical Physics)* 15, 1278-81 (1998).
- [P14] K. Brodsky, R. Mathevet, B. J. Lawson Daku, J. Baudon et J. Robert, "Single and double interaction zone with comoving fields in Stern-Gerlach atom interferometry," *Europhysics Letters* 44, 137-43 (1998).
- [P15] F. Calvo, "Chaos and Dynamical coexistence in Lennard-Jones clusters.," *J Chem Phys* 108, 6861 (1998).
- [P16] F. Calvo, "Free-energy calculation for rotating systems using the Monte-Carlo method," *Chem. Phys. Lett.* 291, 393 (1998).
- [P17] F. Calvo, "The largest Lyapunov exponent in molecular clusters. Linear molecules and application to nitrogen clusters," *Phys. Rev. E.* 58, 5643 (1998).
- [P18] F. Calvo et P. Labastie, "Melting and phase space transitions in small ionic clusters.," *J Phys Chem B* 102, 2051 (1998).
- [P19] F. Calvo et P. Labastie, "Monte-Carlo simulations of rotating clusters," *European Physical Journal D* 3, 229-36 (1998).
- [P20] M. A. Cazalilla, N. Lorente, R. Diez Muino, J. P. Gauyacq, D. Teillet Billy et P. M. Echenique, "Theory of Auger neutralization and deexcitation of slow ions at metal surfaces," *Physical Review B (Condensed Matter)* 58, 13991-4006 (1998).
- [P21] L. Conti, A. M. Cerdonio, L. Taffarello, J. P. Zendri, A. Ortolan, C. Rizzo, G. Ruoso, G. A. Prodi, S. Vitale, G. Cantatore et E. Zavattini, "Optical transduction chain for gravitational wave bar detectors," *Review of Scientific Instruments* 69, 554-8 (1998).
- [P22] B. de Beauvoir, L. Hilico, L. Julien, F. Biraben, B. Cagnac, F. Nez, J. J. Zondy, D. Touahri, O. Acef et A. Clairon, "High resolution spectroscopy of hydrogen and deuterium atoms," *Laser Physics* 8, 561-4 (1998).
- [P23] B. de Beauvoir, F. Nez, L. Hilico, L. Julien, F. Biraben, B. Cagnac, J. J. Zondy, D. Touahri, O. Acef et A. Clairon, "Transmission of an optical frequency through a 3 km long optical fiber," *European Physical Journal D* 1, 227 -29 (1998).
- [P24] S. Fernandez-Alberti, N. Halberstadt, J. A. Beswick et J. Echave, "A theoretical study of photofragmentation and geminate recombination of ICN in solid Ar," *Journal of Chemical Physics* 109, 2844-50 (1998).
- [P25] S. Guibal, C. Mennerat-Robilliard, C. Triché, J. Y. Courtois et G. Grynberg, "Diffusion Rayleigh stimulée dans un réseau d'atomes froids : effet de la pression de radiation et analogie avec l'effet photoréactif," *Annales de Physique* 23 (1998).
- [P26] R. J. Gulley, T. A. Field, W. A. Steer, N. J. Mason, S. L. Lunt, J. P. Ziesel et D. Field, "Electron scattering in ozone and chlorine dioxide," *Journal of Physics B (Atomic, Molecular and Optical Physics)* 31, 5197-208 (1998).
- [P27] R. J. Gulley, T. A. Field, W. A. Steer, N. J. Mason, S. L. Lunt, J. P. Ziesel et D. Field, "Very low energy electron collisions with molecular chlorine," *Journal of Physics B (Atomic, Molecular and Optical Physics)* 31, 2971-80 (1998).

- [P28] R. J. Gulley, S. L. Lunt, J. P. Ziesel et D. Field, "Very low energy electron scattering from benzene and deuterated benzenes," *Journal of Physics B (Atomic, Molecular and Optical Physics)* 31, 2735-51 (1998).
- [P29] K. Khalal-Kouache, A. C. Chami, M. Boudjema, Y. Boudouma, B. Arezki, C. Benazeth et P. Benoit-Cattin, "Low energy helium particles scattered by an amorphized silicon surface," *Alg. J. of Adv. Materials* 2, 87-94 (1998).
- [P30] P. Labastie, J. M. L'Hermite, P. Poncharal, G. Durand et F. Spiegelman, "Spectral Signature and Metallization of Alkali-Halide Clusters," *Zeitschrift-fur-Physikalische-chemie* 203, 15-36 (1998).
- [P31] A. Larson, A. Le Padellec, J. Semaniak, C. Stromholm, M. Larsson, S. Rosen, R. Peverall, H. Danared, N. Djuric, G. H. Dunn et S. Datz, "Branching fractions in dissociative recombination of  $\text{CH}_2^+$ ," *Astrophysical Journal* 505, 459-65 (1998).
- [P32] S. Laube, A. Le Padellec, O. Sidko, C. Rebrion Rowe, J. B. A. Mitchell et B. R. Rowe, "New FALP-MS measurements of  $\text{H}_3^+$ ,  $\text{D}_3^+$  and  $\text{HCO}^+$  dissociative recombination," *Journal of Physics B (Atomic, Molecular and Optical Physics)* 31, 2111-28 (1998).
- [P33] A. Le Padellec, M. Larsson, H. Danared, A. Larson, J. R. Peterson, S. Rosen, J. Semaniak et C. Stroemholm, "A storage ring study of dissociative excitation and recombination of  $\text{D}_3^+$ ," *Physica Scripta* 57, 215-21 (1998).
- [P34] A. Le Padellec, C. Sheehan et J. B. A. Mitchell, "The dissociative recombination of  $\text{CN}^+$ ," *Journal of Physics B (Atomic, Molecular and Optical Physics)* 31, 1725-8 (1998).
- [P35] N. Lorente, M. A. Cazalilla, J. P. Gauyacq, D. Teillet Billy et P. M. Echenique, "Auger neutralization and de-excitation of helium at an aluminium surface: a unified treatment," *Surface Science* 411, L888-93 (1998).
- [P36] N. Lorente, D. Teillet Billy et J. P. Gauyacq, "Charge transfer as responsible for  $\text{H}_2^+$  dissociation on aluminum surfaces," *Surface Science* 402, 197-201 (1998).
- [P37] S. L. Lunt, J. Randell, J. P. Ziesel, G. Mrotzek et D. Field, "Very low energy electron scattering in some hydrocarbons and perfluorocarbons," *Journal of Physics B (Atomic, Molecular and Optical Physics)* 31, 4225-41 (1998).
- [P38] R. Mathevet, K. Brodsky, J. Baudon, R. Brouri, M. Boustimi, B. V. De Lesegno et J. Robert, "Double atom interferometer," *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)* 58, 4039-43 (1998).
- [P39] C. Meier, V. Engel et J. A. Beswick, "Single-collision caging of dissociating  $\text{I}_2$ : wave packet calculations and simulation of femtosecond spectra," *Chemical Physics Letters* 287, 487-95 (1998).
- [P40] C. Meier, V. Engel et U. Manthe, "An effective method for the quantum mechanical description of photoionization with ultrashort intense laser pulses," *Journal of Chemical Physics* 109, 36-41 (1998).
- [P41] C. Mennerat-Robilliard, D. Boiron, J. M. Fournier, A. Aradian, P. Horak et G. Grynberg, "Cooling cesium atoms in a Talbot lattice," *Europhysics Letters* 44, 442-8 (1998).
- [P42] C. Mennerat-Robilliard, L. Guidoni, K. I. Petsas, P. Verkerk, J. Y. Courtois et G. Grynberg, "Bright optical lattices in a longitudinal magnetic field. Experimental study of the oscillating and jumping regimes," *European Physical Journal D* 1, 33-45 (1998).

- [P43] J. Merino, N. Lorente, M. Gusev, F. Flores, M. Maazouz, L. Guillemot et V. A. Esaulov, "Charge transfer of slow H atoms interacting with Al: dynamical charge evolution," *Physical Review B (Condensed Matter)* 57, 1947-56 (1998).
- [P44] S. Meyer, C. Meier et V. Engel, "Photoelectron distributions from femtosecond pump/probe excitation with chirped probe pulses," *Journal of Chemical Physics* 108, 7631-6 (1998).
- [P45] W. More, J. Merino, N. Lorente, F. Flores et M. Gusev, "Resonant processes between He atoms scattering off Al surfaces," *Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics* 62, 605-10 (1998).
- [P46] P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu, A. Bordenave-Montesquieu et M. Benhenni, "Electron capture and transfer-ionization processes in  ${}^4\text{He}^{2+}+\text{Ar}$  at 12.5 keV/amu," *J. Phys. B* 31, L423-30 (1998).
- [P47] S. Mouhammad, P. Benoit-Cattin, C. Benazeth, P. Cafarelli, P. Preynes, M. Richard-Viard et J. P. Ziesel, "Charge exchange and excitation in  $\text{Ne}^+/\text{a}:\text{Si}$  collision at medium energy (2-30 keV). Experiment and simulation," *Journal of Physics: Condensed Matter* 10, 8629-41 (1998).
- [P48] C. Nicole, M. A. Bouchene, V. Blanchet, N. Melikechi et B. Girard, "Contrôle cohérent temporel par interférences quantiques," *Annales de Physique* 23, C1 119 (1998).
- [P49] X. Périole, D. Allouche, A. Ramirez Solis, I. Ortega-Blake, J. P. Daudey et Y. H. Sanejouand, "New effective potentials extraction method for the interaction between cations and water," *J. Phys. Chem. B* 102, 8579-87 (1998).
- [P50] J. R. Peterson, A. Le Padellec, H. Danared, G. H. Dunn, M. Larsson, R. Peverall, C. Stromholm, S. Rosen et W. J. van der Zande, "Dissociative recombination and excitation of  $\text{N}_2^+$ : cross sections and product branching ratios," *Journal of Chemical Physics* 108, 1978-88 (1998).
- [P51] C. Rizzo, "On the measurement of the vacuum magnetic birefringence using a 100 T pulsed magnet," *Europhysics Letters* 41, 483-7 (1998).
- [P52] S. Rosen, R. Peverall, M. Larsson, A. Le Padellec, J. Semaniak, A. Larson, C. Stromholm, W. J. Van Der Zande, H. Danared et G. H. Dunn, "Absolute cross sections and final-state distributions for dissociative recombination and excitation of  $\text{CO}^+(v=0)$  using an ion storage ring," *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)* 57, 4462-71 (1998).
- [P53] J. Semaniak, A. Larson, A. Le Padellec, C. Stromholm, M. Larsson, S. Rosen, R. Peverall, H. Danared, N. Djuric, G. H. Dunn et S. Datz, "Dissociative recombination and excitation of  $\text{CH}_5^+$ : absolute cross sections and branching fractions," *Astrophysical Journal* 498, 886-95 (1998).
- [P54] C. C. Tsao, Y. Wang, R. Napolitano et J. Weiner, "Anisotropy of optical suppression in photoassociative ionization collisions within a slow, collimated sodium atom beam," *European Physical Journal D* 4, 139-44 (1998).

1999

- [P55] A. Bastida, J. Zuniga, A. Requena, N. Halberstadt et J. A. Beswick, "Competition between electronic and vibrational predissociation in Ar-I<sub>2</sub>(B): a molecular dynamics with quantum transitions study," *Chemical Physics* 240, 229-39 (1999).
- [P56] J. Baudon, R. Mathevet et J. Robert, "Atomic interferometry," *Journal of Physics B (Atomic, Molecular and Optical Physics)* 32, R173-95 (1999).
- [P57] J. Baudon, J. Robert, C. Miniatura, O. Gorceix, B. J. Lawson Daku, K. Brodsky, R. Mathevet et F. Perales, "Interferometry with atoms," *Comments At. Mol. Phys.* 34, 161-81 (1999).
- [P58] G. Bazalgette, M. Buchner, C. Champenois, G. Trenec et J. Vigué, "Saturation spectroscopy of the A-X transition of the ICl molecule," *European Physical Journal D* 6, 193-200 (1999).
- [P59] P. Benoit-Cattin, M. Richard-Viard, C. Benazeth, S. Abidi, P. Cafarelli et J. P. Ziesel, "Azimuthal effects in charge exchange processes during interaction of Ne<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>, F<sup>+</sup> ions with a NaCl (100) surface," *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research, Section B (Beam Interactions with Materials and Atoms)* 149, 257-62 (1999).
- [P60] B. Bescos, B. Lang, J. Weiner, V. Weiss, E. Wiedenmann et G. Gerber, "Real-time observation of ultrafast ionization and fragmentation of mercury clusters," *European Physical Journal D* 9, 399-403 (1999).
- [P61] G. Bialolenker, E. Polacco, C. Rizzo et G. Ruoso, "First evidence for the linear magnetic birefringence of the reflecting surface of interferential mirrors," *Applied Physics B (Lasers and Optics)* B68, 703-6 (1999).
- [P62] V. Blanchet, M. Zgierski, T. Seidemann et A. Stolow, "Discerning Vibronic Molecular Dynamics using time-resolved photoelectron Spectroscopy," *Nature* 401, 52-4 (1999).
- [P63] D. Boiron, C. Mennerat-Robilliard, J. M. Fournier, L. Guidoni, C. Salomon et G. Grynberg, "Trapping and cooling cesium atoms in a speckle field," *European Physical Journal D* 7, 373-7 (1999).
- [P64] A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle et D. Bordenave-Montesquieu, "Experimental positions and lifetimes of Be-like 1s<sup>2</sup>3lnl' (n=3 to 5) states of O<sup>4+</sup> and Ne<sup>6+</sup> ions investigated by high resolution electron spectroscopy: test of calculations," *Physica Scripta T80*, 372-4 (1999).
- [P65] M. A. Bouchene, C. Nicole et B. Girard, "Wavepacket interferometry with chirped pulses," *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* 32, 5167-77 (1999).
- [P66] M. Boustimi, J. Baudon, A. Semlali, R. Mathevet et B. Labani, "The problem of an atom inside a cavity in an infinite isotropic medium," *Surface Science* 437, 91-8 (1999).
- [P67] K. Brodsky, F. Perales, J. B. Lawson Daku, R. Mathevet, J. Baudon et J. Robert, "What is the state of a hydrogen atom leaving a Stern-Gerlach interferometer?," *International Journal of Theoretical Physics* 38, 259-76 (1999).
- [P68] F. Calvo, A. Boutin et P. Labastie, "Structure of nitrogen molecular clusters (N<sub>2</sub>)<sub>n</sub> with 13<or=n<or=55," *European Physical Journal D* 9, 189-93 (1999).
- [P69] F. Calvo et F. Spiegelman, "Geometric size effects in the melting of sodium clusters," *Phys. Rev. Lett.* 82, 2270 (1999).

- [P70] V. Castells, O. Atabek et A. Beswick, "Theoretical description of the interaction of CO adsorbed on a  $n(=1,2,\dots)$  Ar/Pt(111) substrate: The transition from chemisorption to physisorption," *Journal of Chemical Physics* 110, 4907-19 (1999).
- [P71] V. Cavero, J. M. L'Hermite, G. Rahmat et R. Vetter, "Cs(6D<sub>3/2</sub>)+H<sub>2</sub> to CsH+H reaction. IV. Rotationally resolved total cross sections," *Journal of Chemical Physics* 110, 3428-36 (1999).
- [P72] C. Champenois, M. Buchner et J. Vigué, "Fringe contrast in three grating Mach-Zehnder atomic interferometers," *European Physical Journal D* 5, 363-74 (1999).
- [P73] C. Dorrer, B. de Beauvoir, C. Le Blanc, S. Ranc, J. P. Rousseau, P. Rousseau, J. P. Chambaret et F. Salin, "Single-shot real-time characterization of chirped-pulse amplification systems by spectral phase interferometry for direct electric-field reconstruction," *Optics Letters* 24, 1644-6 (1999).
- [P74] G. Durand, F. Spiegelmann, P. Poncharal, P. Labastie, J. M. L'Hermite et M. Sence, "One-electron pseudopotential study of Na<sub>n</sub>F<sub>n-1</sub> clusters ( $2 < n < 29$ ). II. Absorption spectra, spectral signature, and classification," *Journal of Chemical Physics* 110, 7884-92 (1999).
- [P75] S. Fernandez-Alberti, N. Halberstadt, J. A. Beswick, A. Bastida, J. Zuniga et A. Requena, "Intramolecular vibrational redistribution and fragmentation dynamics of I<sub>2</sub>...Ne<sub>n</sub> ( $n=2-6$ ) clusters," *Journal of Chemical Physics* 111, 239-44 (1999).
- [P76] N. Ismail, J. L. Heully, T. Saue, J. P. Daudey et C. J. Marsden, "Theoretical studies of the actinides: method calibration for the UO<sub>2</sub><sup>2+</sup> and PuO<sub>2</sub><sup>2+</sup> ions," *Chemical Physics Letters* 300, 296-302 (1999).
- [P77] K. Khalal-Kouache, A. C. Chami, M. Boudjema, Y. Boudouma, P. Benoit-Cattin et C. Benazeth, "Scattering of light particles by solid targets at small angles : transport theory and Monte-Carlo methods," *Alg. J. of Adv. Materials* 3, 3-10 (1999).
- [P78] A. Le Padellec, J. B. A. Mitchell, A. Al Khalili, H. Danared, A. Kallberg, A. Larson, S. Rosen, M. af Ugglas, L. Vikor et M. Larsson, "Storage ring measurements of the dissociative recombination and excitation of the cyanogen ion CN<sup>+</sup>(X<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup> and a<sup>3</sup>π, v = 0)," *Journal of Chemical Physics* 110, 890-901 (1999).
- [P79] N. Lorente, A. G. Borisov, D. Teillet Billy et J. P. Gauyacq, "Parallel velocity assisted charge transfer: F<sup>-</sup> ion formation at Al(111) and Ag(110) surfaces," *Surface Science* 429, 46-53 (1999).
- [P80] N. Lorente, D. Teillet Billy et J. P. Gauyacq, "Theoretical studies of charge transfer in molecular ion-metal surface collisions," *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research, Section B (Beam Interactions with Materials and Atoms)* 157, 1-10 (1999).
- [P81] N. Lorente, D. Teillet Billy et J. P. Gauyacq, "H<sub>2</sub><sup>+</sup> scattered off Al surfaces: The role of the negative ion resonance <sup>2</sup>Σ<sub>u</sub><sup>+</sup>," *Journal of Chemical Physics* 111, 7075-83 (1999).
- [P82] N. Lorente, D. Teillet Billy et J. P. Gauyacq, "The N<sub>2</sub><sup>+</sup>(<sup>2</sup>Π<sub>g</sub>) shape resonance in slow N<sub>2</sub><sup>+</sup> collisions with metallic surfaces," *Surface Science* 432, 155-69 (1999).
- [P83] S. L. Lunt, D. Field, S. V. Hoffmann, R. J. Gulley et J. P. Ziesel, "Very low energy electron scattering in C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>F, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>Cl, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>Br and C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>I," *Journal of Physics B (Atomic, Molecular and Optical Physics)* 32, 2707-17 (1999).

- [P84] L. Marcassa, R. Zanon, S. Dutta, O. Dulieu, V. S. Bagnato et J. Weiner, "Direct measurement of fine structure changing collisional losses in cold trapped  $^{85}\text{Rb}$ ," Euro. Phys. J. D7, 317-21 (1999).
- [P85] C. Meier et D. J. Tannor, "Non-Markovian evolution of the density operator in the presence of strong laser fields," Journal of Chemical Physics 111, 3365-76 (1999).
- [P86] C. Mennerat-Robilliard, D. Lucas, S. Guibal, J. Tabosa, C. Juiczak, J. Y. Courtois et G. Grynberg, "Ratchet for cold rubidium atoms: the asymmetric optical lattice," Physical Review Letters 82, 851-54 (1999).
- [P87] P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu et A. Bordenave-Montesquieu, "Multiple capture investigated by coincident electron spectroscopy in  $X^{7+}+\text{Ar}$ , at 70 keV," Physica Scripta T80, 118-20 (1999).
- [P88] C. Nicole, M. A. Bouchene, C. Meier, S. Magnier, E. Schreiber et B. Girard, "Competition of different ionization pathways in  $\text{K}_2$  studied by ultrafast pump-probe spectroscopy: A comparison between theory and experiment," Journal of Chemical Physics 111, 7857-64 (1999).
- [P89] C. Nicole, M. A. Bouchene, S. Zamith, N. Melikechi et B. Girard, "Saturation of wave-packet interferences : Direct observation of spin precession in potassium atoms," Physical Review A 60, R1755-8 (1999).
- [P90] F. Rabilloud, F. Spiegelman et J. L. Heully, "Ab initio calculations of structural and electronic properties of small silver bromide clusters," J. Chem. Phys. 111, 8925-33 (1999).
- [P91] M. Richard-Viard, N. Benazeth, P. Benoit-Cattin, J. P. Ziesel, C. Benazeth et P. Cafarelli, "Charge exchange in scattering of atomic and molecular deuterium ions on a NaCl surface," Nuclear Instruments & Methods in Physics Research, Section B (Beam Interactions with Materials and Atoms) 149, 7-16 (1999).
- [P92] A. Rizzo et C. Rizzo, "The differential magnetizability and the Cotton-Mouton effect of gases," Molecular Physics 96, 973-8 (1999).
- [P93] C. Schwob, L. Jozefowski, O. Acef, L. Hilico, B. de Beauvoir, F. Nez, L. Julien, A. Clairon et F. Biraben, "Frequency measurement of the 2S-12D transitions in hydrogen and deuterium, new determination of the Rydberg constant," IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement 48, 178-81 (1999).
- [P94] C. Schwob, L. Jozefowski, B. de Beauvoir, L. Hilico, F. Nez, L. Julien, F. Biraben, O. Acef et A. Clairon, "Optical frequency measurement of the 2S-12D transitions in hydrogen and deuterium: Rydberg constant and Lamb shift determinations," Physical Review Letters 82, 4960-3 (1999).
- [P95] C. Sheehan, A. Le Padellec, W. N. Lennard, D. Talbi et J. B. A. Mitchell, "Merged beam measurement of the dissociative recombination of  $\text{HCN}^+$  and  $\text{HNC}^+$ ," Journal of Physics B (Atomic, Molecular and Optical Physics) 32, 3347-60 (1999).
- [P96] N. Suaud, H. Bolvin et J. P. Daudey, "Ab initio calculations of the magnetic coupling between a Ni(II) ion and two nitroxide radicals in cis and trans positions," Inorg. Chem. 38, 6089-95 (1999).
- [P97] G. Velardez, J. L. Heully, A. Beswick et J. P. Daudey, "Ab initio study of the  $\sigma^* \leftarrow n$  electronic transition in formic acid-(water) $_n$  ( $n= 1,2$ ) hydrogen bonded complexes," Phys. Chem. Comm. 6 (1999).

- [P98] L. Viktor, A. Al Khalili, H. Danared, N. Djuric, G. H. Dunn, M. Larsson, A. Le Padellec, S. Rosen et M. af Ugglas, "Branching fractions in the dissociative recombination of  $\text{NH}_4^+$  and  $\text{NH}_2^+$  molecular ions," *Astronomy and Astrophysics* 344, 1027-33 (1999).
- [P99] J. Weiner, V. S. Bagnato, S. Zilio et P. S. Julienne, "Experiments and theory in cold and ultracold collisions," *Reviews of Modern Physics* 71, 1-85 (1999).
- [P100] A. Zaitsevskii, C. Teichteil, J. Vigué et G. Bazalgette, "Quasirelativistic transition moment calculations using the multipartitioning perturbation theory:  $\text{B0}^+ \text{}^3\Pi$  to  $\text{X0}^+ \text{}^1\Sigma^+$  transitions in IF and ICl," *Chemical Physics Letters* 307, 277-82 (1999).
- [P101] S. Zamith, C. Meier, N. Halberstadt et J. A. Beswick, "Time-dependent wave packet study of the one atom cage effect in  $\text{I}_2$ -Ar Van der Waals complexes," *Journal of Chemical Physics* 110, 960-5 (1999).
- [P102] W. Zong, G. H. Dunn, N. Djuric, M. Larsson, C. H. Greene, A. Al Khalili, A. Neau, A. M. Derkatch, L. Viktor, W. Shi, A. Le Padellec, S. Rosen, H. Danared et M. af Ugglas, "Resonant ion pair formation in electron collisions with ground state molecular ions," *Physical Review Letters* 83, 951-4 (1999).
- 2000
- [P103] F. Alary, R. Poteau, J. L. Heully, J. C. Barthelat et J. P. Daudey, "A new method for modelling spectatot chemical groups in ab initio calculations : effective group potentials," *Theor. Chem. Accounts* 104, 174-78 (2000).
- [P104] A. Bastida, J. Zuniga, A. Requena, N. Halberstadt et A. Beswick, "Mixed Quantum Classical Steps: a DVR hopping method," *Phys. Chem. Comm.* 7 (2000).
- [P105] V. Blanchet, M. Zgierski, Z. C. Yan, T. Seidemann, S. Lochbrunner, J. J. Larsen, M. Schmitt, J. P. Shaffer et A. Stolow, "Towards Disentangling Coupled Electronic-vibrational Dynamics in Ultrafast Non-Adiabatic Processes," *Faraday Discussion of the Chemical Society* 115 (2000).
- [P106] C. Boisseau, E. Audouard, J. Vigué et V. V. Flambaum, "Analytical correction to the WKB quantization condition for the highest levels in a molecular potential," *European Physical Journal D* 12, 199-209 (2000).
- [P107] C. Boisseau, E. Audouard, J. Vigué et P. S. Julienne, "Reflection approximation in photoassociation spectroscopy," *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)* 62, 052705/1-10 (2000).
- [P108] A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu, H. Lebius et B. A. Huber, "Hollow ion formation studied by electron spectroscopy of  $^{18}\text{O}^{8+}$ - $\text{C}_{60}$  at 4.4 keV/amu," *J. Phys. B* 33, L357-65 (2000).
- [P109] M. A. Bouchene, C. Nicole et B. Girard, "Interplay between wave packet interferences and second harmonic generation," *Optics Communications* 181, 327-36 (2000).
- [P110] M. Boudjema, N. D'Bichi, Y. Boudouma, A. C. Chami, B. Arezki, K. Khalal, C. Benazeth et P. Benoit-Cattin, "Inelastic energy loss of light particles scattered by solid surfaces at low energy: influence of the 'gap'," *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research, Section B* 164, 588-94 (2000).

- [P111] M. E. Casida, F. Gutierrez, G. Jingang, F. X. Gadéa, D. Salahub et J. P. Daudey, "Charge-transfer correction for improved time-dependent local density approximation excited-state potential energy curves: Analysis within the two-level model with illustration for H<sub>2</sub> and LiH," *Journal of Chemical Physics* 113, 7062-71 (2000).
- [P112] B. de Beauvoir, C. Schwob, O. Acef, L. Jozefowski, L. Hilico, F. Nez, L. Julien, A. Clairon et F. Biraben, "Metrology of the hydrogen and deuterium atoms: Determination of the Rydberg constant and Lamb shifts," *European Physical Journal D* 12, 61-93 (2000).
- [P113] W. DeGraffenreid, J. Ramirez Serrano, Y. M. Liu, R. Napolitano, A. Rosenbaum et J. Weiner, "Structure in the angular dependence of optical suppression of photoassociative ionization collisions within an optically cooled and collimated sodium atom beam," *Applied Physics B (Lasers and Optics)* B71, 881-4 (2000).
- [P114] W. DeGraffenreid, J. Ramirez Serrano, Y. M. Liu et J. Weiner, "Continuous, dense, highly collimated sodium beam," *Review of Scientific Instruments* 71, 3668-76 (2000).
- [P115] C. Dorrer, B. de Beauvoir, C. Le Blanc, J.-P. Rousseau, S. Ranc, P. Rousseau, J.-P. Chambaret et F. Salin, "Characterization of chirped-pulse amplification systems with spectral phase interferometry for direct electric-field reconstruction," *Applied Physics B* 70, S77-S84 (2000).
- [P116] V. A. Ermoshin, V. Engel et C. Meier, "Collision-induced bound state motion in I<sub>2</sub>. A classical molecular dynamics study," *Journal of Chemical Physics* 113, 6585-91 (2000).
- [P117] V. A. Ermoshin, V. Engel et C. Meier, "Oscillatory pump-probe signals from delocalized wave packets," *Journal of Chemical Physics* 113, 5770-5 (2000).
- [P118] S. Fernandez-Alberti, J. A. Echave, V. Engel, N. Halberstadt et J. A. Beswick, "Hybrid quantum/classical study of ICN in an Ar matrix: Photofragmentation and cage exit," *Journal of Chemical Physics* 113, 1027-34 (2000).
- [P119] D. Field, N. C. Jones, J. M. Gingell, N. J. Mason, S. L. Lunt et J. P. Ziesel, "Electron scattering in chlorine dioxide," *Journal of Physics B (Atomic, Molecular and Optical Physics)* 33, 1039-46 (2000).
- [P120] E. Gindensperger, C. Meier et J. A. Beswick, "Mixing quantum and classical dynamics using Bohmian trajectories," *Journal of Chemical Physics* 113, 9369-72 (2000).
- [P121] A. L. Godunov, P. B. Ivanov, V. A. Schipakov, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu et A. Bordenave-Montesquieu, "Excitation of autoionizing states of helium by 100 keV proton impact. II. Excitation cross sections and mechanisms of excitation," *J. Phys. B* 33, 971-99 (2000).
- [P122] G. Grynberg, P. Horak et C. Mennerat-Robilliard, "Spatial diffusion of atoms cooled in a speckle field," *Europhysics Letters* 49, 424-30 (2000).
- [P123] J. Helbing, S. Chergui, S. Fernandez-Alberti, J. Echave, N. Halberstadt et A. Beswick, "Caging and excited state emission of ICN trapped in cryogenic matrices: experiment and theory," *Phys.Chem. Phys.* 2, 4131-38 (2000).
- [P124] D. Khalil, N. Billy, G. Gouedard et J. Vigué, "Crossed beam studies of some chemiluminescent reactions producing IF," *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2, 729-36 (2000).



- [P125] A. Larson, N. Djuric, W. Zong, C. H. Greene, A. E. Orel, A. Al Khalili, A. M. Derkatch, A. Le Padellec, A. Neau, S. Rosen, W. Shi, L. Viktor, H. Danared, M. af Ugglas, M. Larsson et G. H. Dunn, "Resonant ion-pair formation in electron collisions with  $\text{HD}^+$  and  $\text{OH}_2^+$ ," *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)* 62, 042707/1-8 (2000).
- [P126] J. M. L'Hermite, L. Marcou, F. Rabilloud et P. Labastie, "A new method to study metastable fragmentation of clusters using a reflectron time-of-flight mass spectrometer," *Review of Scientific Instruments* 71, 2033-7 (2000).
- [P127] V. Lhiaubet, F. Gutierrez, F. Penaud-Berruyer, E. Amouyal, J. P. Daudey, R. Poteau, N. Chouini-Lalanne et N. Paillous, "Spectroscopic and theoretical studies of the excited states of Fenofibric acid and Ketoprofen in relation with their photosensitizing properties," *New Journal of Chemistry* 24, 403-10 (2000).
- [P128] N. Lorente et M. Persson, "Theory of single molecule vibrational spectroscopy and microscopy," *Physical Review Letters* 85, 2997-3000 (2000).
- [P129] N. Lorente et M. Persson, "Theoretical Aspects of Tunneling-Current Induced Bond Excitation and Breaking at Surfaces," *Faraday Discussion of the Chemical Society* 117, 277 (2000).
- [P130] R. Mathevet, J. Robert et J. Baudon, "Genericity property of comoving potentials," *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)* 61, 033604/1-5 (2000).
- [P131] P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu et A. Bordenave-Montesquieu, "Dissociative double capture in  $^{18}\text{O}^{8+} + \text{CO}_2$  collision," *J. Phys. B* 33, L735-42 (2000).
- [P132] P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu et A. Bordenave-Montesquieu, "Fragmentation of  $\text{CO}_2$  into  $\text{C}^+ + \text{O}^+ + \text{O}$ , in collisions with protons," *J. Phys. B* 33, L539-46 (2000).
- [P133] A. Neau, A. Al Khalili, S. Rosen, A. Le Padellec, A. M. Derkatch, W. Shi, L. Viktor, M. Larsson, J. Semaniak, R. Thomas, M. B. Nagard, K. Andersson, H. Danared et M. Ugglas, "Dissociative recombination of  $\text{D}_3\text{O}^+$  and  $\text{H}_3\text{O}^+$ : Absolute cross sections and branching ratios," *Journal of Chemical Physics* 113, 1762-70 (2000).
- [P134] J. Opitz, H. Lebius, S. Tomita, B. A. Huber, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu, A. Bordenave-Montesquieu, A. Reinköster, U. Werner, H. O. Lutz, A. Niehaus, M. Benndorf, K. Haghighat, H. T. Schmidt et H. Cederquist, "Electronic excitation in  $\text{H}^+ - \text{C}_{60}$  collision: evaporation and ionization," *Phys. Rev. A* 62, 022705 (2000).
- [P135] A. Ramirez-Solis et J. P. Daudey, "The spectroscopy of  $\text{AgF}$ : CASSCF+CASPT2 calculations on the lowest  $^3\Sigma^+$ ,  $^1\Sigma^+$ ,  $^3\Pi$ ,  $^1\Pi$ ,  $^3\Delta$ , and  $^1\Delta$  excited states," *Journal of Chemical Physics* 113, 8580-8 (2000).
- [P136] M. Richard-Viard, C. Benazeth, P. Benoit-Cattin, P. Cafarelli, S. Abidi et J. P. Ziesel, "Scattering of 4 keV  $\text{Ne}^+$ ,  $\text{Na}^+$  and  $\text{F}^+$  ions from a  $\text{NaCl}$  (100) surface under a small angle of incidence. Angular distributions and charge fractions," *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research, Section B (Beam Interactions with Materials and Atoms)* 164, 575-82 (2000).
- [P137] S. Rosen, A. M. Derkatch, J. Semaniak, A. Neau, A. Al Khalili, A. Le Padellec, L. Viktor, H. Danared, M. Ugglas, R. Thomas et M. Larsson, "Recombination of simple molecular ions studies in storate ring - Dissociative Recombination of  $\text{H}_2\text{O}^+$ ," *Faraday Discussion of the Chemical Society* (2000).

- [P138] E. Sokell, S. Zamith, M. A. Bouchene et B. Girard, "Polarization dependent pump-probe studies in atomic fine structure levels : towards the production of spin-polarized electrons," *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* 33, 2005-15 (2000).
- [P139] D. Talbi, A. Le Padellec et J. B. A. Mitchell, "Quantum chemical calculations for the dissociative recombination of  $\text{HCN}^+$  and  $\text{HNC}^+$ ," *Journal of Physics B (Atomic, Molecular and Optical Physics)* 33, 3631-46 (2000).
- [P140] J. Vigué, P. Labastie et F. Calvo, "Evidence for  $N^{1/3}$ -dependence of the sticking cross-section of atoms on small and medium-size van der Waals clusters," *European Physical Journal D* 8, 265-72 (2000).
- [P141] S. Zamith, M. A. Bouchene, E. Sokell, C. Nicole, V. Blanchet et B. Girard, "Pump probe experiment in atomic fine structure levels : observation of the oscillation of an angular wave packet," *European Physical Journal D* 12, 255-61 (2000).

2001

- [P142] K. Andersson, D. Hanstorp, A. Neau, S. Rosen, H. T. Schmidt, R. Thomas, M. Larsson, J. Semaniak, F. Osterdahl, H. Danared, A. Kallberg et A. Le Padellec, "Electron impact single detachment on the  $\text{F}^-$  ions using the heavy ion storage ring CRYRING: cross-section determination," *European Physical Journal D* 13, 323-8 (2001).
- [P143] S. Askenazy, C. Rizzo et O. Portugall, "A dipole high-field pulsed magnet to explore the magnetic birefringence of vacuum," *Physica B* 294, 5-9 (2001).
- [P144] V. Blanchet, M. Z. Zgierski et A. Stolow, "Electronic continua in time-resolved photoelectron spectroscopy. I. Complementary ionization correlations," *Journal of Chemical Physics* 113, 1194-205 (2001).
- [P145] C. Boisseau, E. Andouard et J. Vigué, "Comment on "Breakdown of Bohr's correspondence principle"," *Physical Review Letters* 86, 2694 (2001).
- [P146] D. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle, A. Bordenave-Montesquieu et A. Rentenier, "Scaling of  $\text{C}_{60}$  ionization and fragmentation with the energy deposited in collisions with  $\text{H}^+$ ,  $\text{H}_2^+$ ,  $\text{H}_3^+$  and  $\text{He}^+$  ions (2–130 keV)," *J. Phys. B* 34, L137-46 (2001).
- [P147] M. A. Bouchene, S. Zamith et B. Girard, "Spin polarised electrons produced by a sequence of two femtosecond pulses. Calculation of differential and global polarisation rates," *Journal of Physics B* 34, 1497-512 (2001).
- [P148] F. Brandi, M. Bregant, G. Cantatore, F. Della Valle, S. Carusotto, G. Di Domenico, U. Gastaldi, E. Milotti, R. Pengo, E. Polacco, C. Rizzo, G. Ruoso, E. Zavattini et G. Zavattini, "Optical production and detection of dark matter candidates," *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research, Section A (Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment)* 461, 329-31 (2001).
- [P149] C. Champenois, M. Buchner, R. Delhuille, R. Mathevet, C. Robilliard, C. Rizzo et J. Vigué, "Atomic diffraction by a laser standing wave: analysis using Bloch states," *European Physical Journal D* 13, 271-8 (2001).
- [P150] C. Cohen-Tannoudji et C. Robilliard, "Wave functions, relative phase and interference for atomic Bose-Einstein condensates," *Comptes Rendus de l'Academie des Sciences, Serie IV (Physique, Astrophysique)* 2, 445-77 (2001).

- [P151] J. Degert, C. Meier, B. Girard et M. J. J. Vrakking, "Time-dependent fragment distributions detected via pump-probe ionization: a theoretical approach," *European Physical Journal D* 14, 257-65 (2001).
- [P152] R. Delhuille, C. Champenois, M. Buchner, L. Jozefowski, T. Lahaye, R. Mathevet, A. Miffre, C. Rizzo, C. Robilliard, G. Trenec et J. Vigué, "Some theoretical and experimental aspects of three-grating Mach-Zehnder atom interferometers," *Comptes Rendus de l'Academie des Sciences, Serie IV (Physique, Astrophysique)* 2, 587-93 (2001).
- [P153] N. Djuric, G. H. Dunn, A. Al Khalili, A. M. Derkatch, A. Neau, S. Rosen, W. Shi, L. Viktor, W. Zong, M. Larsson, A. Le Padellec, H. Danared et M. af Ugglas, "Resonant ion-pair formation and dissociative recombination in electron collisions with ground-state  $\text{HF}^+$  ions," *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)* 64, 022713/1-9 (2001).
- [P154] D. Field, N. C. Jones, S. L. Lunt et J. P. Ziesel, "Experimental evidence for a virtual state in a cold collision: Electrons and carbon dioxide," *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)* 64, 022708-13 (2001).
- [P155] D. Field, N. C. Jones, S. L. Lunt, J. P. Ziesel et R. J. Gulley, "Low energy electron scattering in  $\text{CF}_2\text{Cl}_2$  and  $\text{CF}_3\text{Cl}$ ," *Journal of Chemical Physics* 115, 3045-52 (2001).
- [P156] D. Field, S. L. Lunt et J. P. Ziesel, "The quantum world of cold electron collisions," *Accounts of Chemical Research* 34, 291-98 (2001).
- [P157] D. Field, J. P. Ziesel, S. L. Lunt, R. Parthasarathy, L. Suess, S. B. Hill, F. B. Dunning, P. P. Lucchese et F. A. Gianturco, "Very low energy electron scattering from benzene: experiment and theory," *Journal of Physics B (Atomic, Molecular and Optical Physics)* 34, 4371-81 (2001).
- [P158] G. Grynberg et C. Robilliard, "Cold atoms in dissipative optical lattices," *Physics Reports* 355, 335-451 (2001).
- [P159] K. Khalal-Kouache, A. C. Chami, M. Boudjema, P. Benoit-Cattin, C. Benazeth et Y. Boudouma, "Transport theory and Monte Carlo simulation of the scattering of low energy  $\text{Li}^+$  ions from a polycrystalline nickel surface," *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research, Section B (Beam Interactions with Materials and Atoms)* 183, 279-84 (2001).
- [P160] A. Larson, N. Djuric, W. Zong, C. H. Green, A. E. Orel, A. Al Khalili, A. M. Derkatch, A. Le Padellec, A. Neau, S. Rosen, W. Shi, L. Viktor, H. Danared, M. af Ugglas, M. Larsson et G. H. Dunn, "Resonant ion-pair formation and dissociative recombination in electron collisions with ground-state  $\text{HF}^+$  ions," *Phys. Rev. A* 64, 022713/1-9 (2001).
- [P161] A. Le Padellec, K. Andersson, D. Hanstorp, E. Hellberg, M. Larsson, A. Neau, S. Rosen, H. T. Schmidt, R. Thomas, J. Semaniak, D. J. Pegg, F. Osterdahl, H. Danared et A. Kallberg, "Electron scattering on  $\text{CN}^+$ ," *Physica Scripta* 64, 467-73 (2001).
- [P162] A. Le Padellec, N. Djuric, A. Al Khalili, H. Danared, A. M. Derkatch, A. Neau, D. B. Popovic, S. Rosen, J. Semaniak, R. Thomas, M. af Ugglas, W. Zong et M. Larsson, "Resonant ion-pair formation in the recombination of  $\text{NO}^+$  with electrons: Cross-section determination," *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)* 64, 012702/1-7 (2001).

- [P163] A. Le Padellec, F. Rabilloud, D. Pegg, A. Neau, F. Hellberg, R. Thomas, H. T. Schmidt, M. Larsson, H. Danared, A. Kallberg, K. Andersson et D. Hanstorp, "Electron-impact detachment and dissociation of  $C_4^-$  ions," *Journal of Chemical Physics* 115, 10671-7 (2001).
- [P164] M. Lezius, V. Blanchet, D. M. Rayner, D. M. Villeneuve, A. Stolow et M. Y. Ivanov, "Nonadiabatic Multi-electron Dynamics in Strong Field Molecular Ionization," *Physical Review Letters* 86, 51-54 (2001).
- [P165] J. M. L'Hermite, F. Rabilloud, P. Labastie et F. Spiegelman, "Evidence for trimers evaporation in silver bromide clusters," *European Physical Journal D* 16, 77-80 (2001).
- [P166] J. M. L'Hermite, F. Rabilloud, L. Marcou et P. Labastie, "Metastable fragmentation of silver bromide clusters," *European Physical Journal D* 14, 323-30 (2001).
- [P167] N. Lorente, M. Persson, L. J. Lauhon et W. Ho, "Symmetry selection rules for vibrationally inelastic tunneling," *Physical Review Letters* 86, 2593-6 (2001).
- [P168] B. I. Lundqvist, A. Bogicevic, K. Carling, S. V. Dudiy, S. Gao, J. Hartford, P. Hyldgaard, N. Jacobson, D. C. Langreth, N. Lorente, S. Ovesson, B. Razaznejad, C. Ruberto, H. Rydberg, E. Schroder, S. I. Simak, G. Wahnstrom et Y. Yourdshahyan, "Density-functional bridge between surfaces and interfaces," *Surface Science* 493, 253-70 (2001).
- [P169] S. L. Lunt, D. Field, J. P. Ziesel, N. C. Jones et R. J. Gulley, "Very low energy electron scattering in nitromethane, nitroethane, and nitrobenzene," *International Journal of Mass Spectrometry* 205, 197-208 (2001).
- [P170] C. Meier et U. Manthe, "Full-dimensional quantum study of the vibrational predissociation of the  $I_2 \dots Ne_2$  cluster," *Journal of Chemical Physics* 115, 5477-84 (2001).
- [P171] P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu et A. Bordenave-Montesquieu, "Interaction of multicharged ions with molecules ( $CO_2$ ,  $C_{60}$ ) by coincident electron spectroscopy," *Physica Scripta T92*, 57-60 (2001).
- [P172] P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu, A. Rentenier et A. Bordenave-Montesquieu, "Interaction of protons with the  $C_{60}$  molecule: calculation of deposited energies and electronic stopping cross sections ( $v \leq 5$  au)," *J. Phys. B* 34, L611-6 (2001).
- [P173] R. Peverall, S. Rosen, J. R. Peterson, M. Larsson, A. Al Khalili, L. Vikor, J. Semaniak, R. Bobbenkamp, A. Le Padellec, A. N. Maurellis et W. J. van der Zande, "Dissociative recombination and excitation of  $O_2^+$ : Cross sections, product yields and implications for studies of ionospheric airglows," *Journal of Chemical Physics* 114, 6679-89 (2001).
- [P174] D. Peyrade, R. Quidant, J.-C. Weeber, A. Dereux, G. Lévêque, C. Girard et Yon Chen, "Simultaneous observation of light localization and confinement in near-field optics," *Europhysics Letters* 56, 517-22 (2001).
- [P175] R. Poteau, F. Alary, H. Abou El Makarim, J. L. Heully, J. C. Barthelat et J. P. Daudey, "Effective group potentials. 2. Extraction and transferability for Chemical groups involved in covalent or donor-acceptor bonds," *J. Phys. Chem. A* 105, 206-14 (2001).
- [P176] R. Poteau, I. Ortega, F. Alary, A. Ramirez Solis, J. C. Barthelat et J. P. Daudey, "Effective group potentials. 1. Method," *J. Phys. Chem. A* 105, 198-205 (2001).

- [P177] F. Rabilloud, F. Spiegelman, J. M. L'Hermite et P. Labastie, "Ab initio study of silver bromide  $\text{Ag}_n\text{Br}_p^+$  clusters ( $n \leq 6, p = n, n-1$ )," *Journal of Chemical Physics* 114, 289-305 (2001).
- [P178] A. Ramirez-Solis, V. Vallet, C. Teichteil, T. Leininger et J. P. Daudey, "Accurate ab initio study on the spectroscopy of Ag and  $\text{Ag}^+$  including spin-orbit couplings aimed at molecular calculations," *Journal of Chemical Physics* 115, 3201-7 (2001).
- [P179] K. Resch, V. Blanchet, A. Stolow et T. Seidemann, "Toward Polyatomic Wave Packet Decomposition: Final State Effects," *Journal of Physical Chemistry A* 105, 2756-63 (2001).
- [P180] M. Richard-Viard, S. Abidi, C. Benazeth, P. Benoit-Cattin et P. Cafarelli, "Azimuthal dependence of charge exchange in grazing scattering of 4 keV ions on a NaCl (100) surface : role of the trajectory," *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research, Section B (Beam Interactions with Materials and Atoms)* 184, 490-99 (2001).
- [P181] G. Rikken et C. Rizzo, "Magnetolectric birefringences of the quantum vacuum," *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)* 63, 012107/1-4 (2001).
- [P182] O. Roncero, B. Lepetit, A. Beswick, N. Halberstadt et A. A. Buchachenko, "Ar...I<sub>2</sub>(X) → Ar + I<sub>2</sub>(B) photodissociation: Comparison between linear, T-shape isomers dynamics," *J Chem Phys* 115, 6961-63 (2001).
- [P183] M. Schmidt, T. Hippler, J. Donges, W. Kronmuller, B. von Issendorff, H. Haberland et P. Labastie, "Caloric curve across the liquid-to-gas change for sodium clusters," *Physical Review Letters* 87, 203402/1-4 (2001).
- [P184] G. Velardez, J. C. Ferrero, A. Beswick et J. P. Daudey, "Ab initio Study of the Structures and  $\pi^* \leftarrow n$  Electronic Transition in Formic Acid-(water)<sub>n</sub> (n= 3,4 and 5) Hydrogen Bonded Complexes," *J. Phys. Chem. A* 105, 8769-74 (2001).
- [P185] S. Zamith, J. Degert, S. Stock, B. De Beauvoir, V. Blanchet, M. A. Bouchene et B. Girard, "Observation of Coherent Transients in Ultrashort Chirped Excitation of an undamped Two-Level System," *Physical Review Letters* 87, 033001 (2001).
- [P186] J. P. Ziesel, R. Azria et D. Teillet Billy, "Dissociative electron attachment in highly polar molecules: sodium halides," *International Journal of Mass Spectrometry* 205, 137-48 (2001).

2002

- [P187] A. Adamczak, D. Bakalov, K. Bakalova, E. Polacco et A. Rizzo, "Magnetolectric birefringences of the quantum vacuum," *Hyperfine Interactions* (2002).
- [P188] A. Bastida, J. Zuniga, A. Requena, B. Miguel, A. Beswick, J. Vigué et N. Halberstadt, "Molecular dynamics simulation of the I<sub>2</sub>(X)...Ar isomers population in a free-jet expansion: Thermodynamics versus kinetic control," *J Chem Phys* (2002).
- [P189] A. Beswick, "Quantum hopping techniques applied to vibrational energy transfer," *Comp. Phys. Comm.* (2002).
- [P190] A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle et D. Bordenave-Montesquieu, "Comment 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* (2002).
- [P191] E. Gindensperger, C. Meier et A. Beswick, "Quantum-classical description including continuum states using quantum trajectories," *J Chem Phys* 116, 8-13 (2002).

- [P192] E. Gindensperger, C. Meier, A. Beswick et M.-C. Heitz, "Quantum-classical description of rotational diffractive scattering using Bohmian trajectories: comparison with full quantum wave packet results," *J Chem Phys* (2002).
- [P193] G. Lévêque, G. Colas des Francs, C. Meier, R. Mathevet, C. Robilliard, C. Girard, J.-C. Weeber et J. Weiner, "Polarization state of the near optical field," *Phys. Rev. E* (2002).
- [P194] C. Nicole, M. A. Bouchene et B. Girard, "Dynamics and interference of fine-structure wave packets created by strong ultrashort pulses," *Journal of Modern Optics* 49, 183-200 (2002).
- [P195] C. Robilliard, D. Lucas et G. Grynberg, "Modelling a ratchet with cold atoms in an optical lattice," *Appl. Phys. A* (2002).
- [P196] G. Balint-Kurti, E. J. Orr-Ewing, A. Beswick, A. Brown et O. S. Vasyuntinskii, "Vector correlations and alignment parameters in the Photodissociation of HF," *J Chem Phys* (soumis 2002).
- [P197] A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle et D. Bordenave-Montesquieu, "High-resolution electron spectroscopy of the 1s23lnl' Be-like series in oxygen and neon. Test of theoretical data. I-General considerations," *J. Phys. B* (soumis 2002).
- [P198] A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle et D. Bordenave-Montesquieu, "High-resolution electron spectroscopy of the 1s23lnl' Be-like series in oxygen and neon. Test of theoretical data. II-Experimental results," *J. Phys. B* (soumis 2002).
- [P199] M. A. Bouchene, "Dynamique et interférences de paquets d'ondes dans les atomes et molécules d'alcalins," *Annales de Physique Soumis* (soumis 2002).
- [P200] J. C. Delagnes et M. A. Bouchene, "Compensation of Wave packet spreading with linearly chirped pulses : theoretical analysis," *Journal of Physics B* (soumis 2002).
- [P201] R. Delhuille, C. Champenois, M. Buchner, L. Jozefowski, A. Rizzo, G. Trenec et J. Vigué, "High contrast Mach-Zehnder lithium atom interferometer in the Bragg regime," *Applied Physics B* (soumis 2002).
- [P202] R. Delhuille, A. Miffre, E. Iavallette, M. Buchner, A. Rizzo, G. Trenec, J. Vigué, H. J. Loesch et J. P. Gauyacq, "Optimization of a Langmuir-Taylor detector for lithium," *Rev. Sci. Instr.* (soumis 2002).
- [P203] M. F. G. Hedouin, R. E. Palmer, M. Persson et N. Lorente, "Calculations of chemisorption and STM images of C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> on Cu(100)," *Journal of Chemical Physics* (soumis 2002).
- [P204] B. Lepetit, O. Roncero, A. Buchachenko et N. Halberstadt, "Electronic and vibrational predissociation in ArI<sub>2</sub> photodissociation dynamics," *J Chem Phys* (soumis 2002).
- [P205] G. Lévêque, C. Meier, R. Mathevet, C. Robilliard, C. Girard, J.-C. Weeber et J. Weiner, "Atomic diffraction from nanostructured optical potentials," *Phys. Rev. A* (soumis 2002).
- [P206] M. Lezius, V. Blanchet, M. Y. Ivanov et A. Stolow, "Intense laser field ionization of polyatomic molecules," *Journal of Chemical Physics* (soumis 2002).
- [P207] R. Mathevet, D. Bakalov et A. Rizzo, "Computation of the phase induced by non-newtonian gravitational potentials in atom interferometry," *Classical and Quantum Gravity* (soumis 2002).
- [P208] F.-E. Olsson, N. Lorente et M. Persson, "STM images of molecularly and atomically chemisorbed oxygen on silver," *Surface Science* (soumis 2002).

- [P209] F.-E. Olsson, N. Lorente, M. Persson, L.-J. Lauthon et W. Ho, "STM images and chemisorption bond parameters of acetylene, ethynyl and dicarbon chemisorbed on copper," *J Chem Phys* (soumis 2002).
- [P210] J. Ramirez Serrano, W. DeGraffenreid et J. Weiner, "Polarization-Dependent Spectra in the Photoassociative Ionization of Cold Atoms in a Bright Sodium Beam," *Phys. Rev. A* (soumis 2002).

## 10.2. Les communications avec actes

1998

- [C1] V. Blanchet et A. Stolow, "Time-resolved configuration interaction," présenté à *Ultrafast Phenomena XI*, pp 456-8, Berlin, Springer, 1998.
- [C2] R. Pengo, D. Bakalov, U. Gastaldi, G. Petrucci, G. Bialolenker, E. Brandi, E. Polacco, G. Cantatore, F. Della Valle, P. Micossi, A. Rizzo, E. Zavattini, E. Iacopini, M. Bregant, G. Ruoso et E. Zavattini, "Magnetic birefringence of Vacuum: the PVLAS experiment," présenté à *Workshop on Frontier tests of Quantum Electrodynamics and physics of the Vacuum*, vol 59, Sandanski, Bulgaria, 1998.
- [C3] E. Zavattini, D. Bakalov et A. Rizzo, "Workshop Frontier Tests of Quantum Electrodynamics and Physics of the Vacuum, Sandanski, Bulgaria, 9-15 June 1998," Sofia, Bulgarie, 1998.
- [C4] C. Champenois, C. Boisseau, E. Audouard, J. Vigué, Indice de réfraction pour les ondes atomiques. *Ann. Phys. Fr.* 23 C1 pp 223-224 (1998)
- [C5] D. Bakalov, F. Brandi, G. G. Cantatore, G. Carugno, S. Carusotto, F. Della Valle, A.M. De Riva, U. Gastaldi, E. Iacopini, P. Micossi, E. Milotti, R. Onofrio, R. Pengo, F. Perrone, G. Petrucci, E. Polacco, C. Rizzo, G. Ruoso, E. Zavattini, G. Zavattini, Experimental method to detect the magnetic birefringence of vacuum, *Proc. of the Conference on polarization effects in laser spectroscopy*, Toronto, Canada, May 1997, N.B. Abraham, G.M. Stephan eds., *Quantum Semiclass. Opt.* 10, pp. 239-250 (1998)
- [C6] D. Bakalov, F. Brandi, G. G. Cantatore, G. Carugno, S. Carusotto, F. Della Valle, A.M. De Riva, U. Gastaldi, E. Iacopini, P. Micossi, E. Milotti, R. Onofrio, R. Pengo, F. Perrone, G. Petrucci, E. Polacco, C. Rizzo, G. Ruoso, E. Zavattini, G. Zavattini, The measurement of vacuum polarization : the PVLAS experiment, *Proc. of the 3rd Euroconference on atomic physics with stored highly charged ions*, Ferrara, Italy, September 1997, *Hyperfine Interactions*, 114, pp. 103-113 (1998)
- [C7] R. Pengo, D. Bakalov, U. Gastaldi, G. Petrucci, G. Bialolenker, F. Brandi, E. Polacco, Cantatore G., Della Valle F., Micossi P., Milotti E., C. Rizzo, Zavattini E., Iacopini E., Bregant M., Ruoso G., Zavattini G., Magnetic birefringence of vacuum: the PVLAS experiment, *Proc. of the workshop on Frontier tests of Quantum Electrodynamics and physics of the vacuum*, Sandanski, Bulgaria, June 1998, E. Zavattini, D. Bakalov, Rizzo C. eds., Heron Press, Sofia, Bulgarie, pp. 59-71 (1998)
- [C8] S. Guibal, C. Mennerat-Robilliard, C. Triché, J.-Y. Courtois, G. Grynberg, Diffusion Rayleigh stimulée dans un réseau d'atomes froids : effet de la pression de radiation et

analogie avec l'effet photoréfractif, Actes de COLOQ V, Ann. Phys. Fr. 23, 1998 (Colloque C1, supplément au n°1) pp. 201-202

- [C9] R. J. Gulley, T. A. Field., W. A. Steer, N. J. Mason, S. L. Lunt, J.-P. Ziesel, D. Field, *Very low energy electron scattering from ozone and chlorine dioxide*, Bull. Am. Phys. Soc. 43, 1472 (1998).
- [C10] R. J. Gulley, T. A. Field., W. A. Steer, N. J. Mason, S. L. Lunt, J.-P. Ziesel, D. Field, *Very low energy electron scattering from molecular chlorine*, Bull. Am. Phys. Soc. 43, 1495 (1998).

1999

- [C11] M. A. Bouchene, S. Zamith, B. Girard, T. Frohnmeyer, M. Strehle, U. Weichmann et G. Gerber, "Interferences of ultrafast free electron wave packets," présenté à Laser Spectroscopy. XIV International Conference, pp 338-9, Innsbrück (Austria), World Scientific, 1999.

2000

- [C12] G. Kranzelbinder, E. Toussaere, R. Mathevet, D. Josse et J. Zyss, "Organic DFB-lasers with mode emission tuneability by dynamic and permanent photoinduced gratings," présenté à Conference on Lasers and Electro Optics, vol 39, 2000.
- [C13] E. Schreiber, C. Nicole, M. A. Bouchene, C. Meier et B. Girard, "Competition of different ionisation pathways in  $K_2$  investigated by fs pump and probe spectroscopy: experiment and theory," présenté à Quantum Electronics and Laser Science Conference, vol 40, 2000.
- [C14] R. Mathevet, K. Brodsky, F. Perales, M. Boustimi, B. Viaris de Lesegno, J. Robert, J. Baudon, Some new effects in atom Stern-Gerlach interferometry, in "Atomic, molecular Beams, The State of the Art 2000", R. Campargue ed., Springer (2000)
- [C15] G. Kranzelbinder, E. Toussaere, R. Mathevet, D. Josse, J. Zyss, Organic DFB-lasers with mode emission tuneability by dynamic and permanent photoinduced gratings, Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO 2000), TOPS Vol.39, Opt. Soc. America (2000) p. 113

2001

- [C16] S. Askenazy, J. Billette, P. Dupre, P. Ganau, J. Mackowski, J. Marquez, L. Pinard, O. Portugall, D. Ricard, G. Rikken, C. Rizzo, G. Trenec et J. Vigué, "A 25 T dipole pulsed magnet to study the magnetic birefringence of vacuum: the BMV project," présenté à AIP Conference Proceedings. no., vol 564, pp 115-22, 2001.
- [C17] R. Delhuille, C. Champenois, M. Buchner, R. Mathevet, C. Rizzo, C. Robilliard et J. Vigué, "Atom interferometry: Principles and applications to fundamental physics, Quantum electrodynamics and the physics of vacuum," présenté à Workshop QED 2000, AIP Conference Proceedings, vol 564, pp 192-99, Trieste, Italie, 2001.



- [C18] S. Askenazy, C. Rizzo, O. Portugall, A dipole high field pulsed magnet to explore the magnetic birefringence of vacuum : formulae for the magnet characteristics, Proc. of the 6th International Symposium on Research in High Magnetic Fields, Porto, Portugal, August 2000, Physica B 294-295, (2001) pp 5-9.
- [C19] C. Champenois,, M. Büchner, R. Delhuille, R. Mathevet, C. Robilliard, C. Rizzo, J. Vigué, A novel method to test atom neutrality with a Mach-Zehnder atom interferometer, Workshop Hydrogen Atom II, Castiglione della Pescaia, Italie, Juin 2000, S. G. Karshenboim, F. Pavone, F. Bassani, T. W. Hänsch, M. Inguscio éditeurs, Springer Lecture Notes in Physics p 554 (2001)
- [C20] S. Askenazy,,J. Billette, P. Dupré, P. Ganau, J. Mackowski, J. Marquez, L. Pinard, O. Portugall, D. Ricard, G.-L.-J.-A. Rikken, C. Rizzo, G. Trenec, J. Vigué, A 25 T dipole pulsed magnet to study the magnetic birefringence of vacuum : the BMV project, Quantum electrodynamics and the physics of vacuum, Proceedings of the Workshop QED 2000, Trieste, Italie Octobre 2000, AIP conference proceedings 564, G. Cantatore ed., pp. 115-122 (2001)
- [C21] R. Delhuille, C. Champenois, M. Büchner, R. Mathevet, C. Rizzo, C. Robilliard, J. Vigué, Atom interferometry : principles and applications to fundamental physics, Quantum electrodynamics and the physics of vacuum, Workshop QED 2000, Trieste, Italie Octobre 2000, AIP conference proceedings 564, G. Cantatore ed., pp 192-199 (2001)

2002

- [C22] S. Zamith, V. Blanchet, B. Girard, J. Norin, J. Mauritsson, A. L'Huillier, J. Andersson, S. Sorensen, I. Hjelte, O. Bjorneholm et D. Gauyacq, "Predissociation dynamics of acetylene Rydberg states," présenté à Femtochemistry V, pp XXX, Singapore, World Scientific, 2002.
- [C23] [S. Zamith, J. Degert, S. Stock, B. de Beauvoir, V. Blanchet, M. A. Bouchène et B. Girard, "Effect of coherent transients on a pump-probe time resolved signal," présenté à Femtochemistry V, pp XXX, Singapore, World Scientific, 2002.
- [C24] D. Field, N. C. Jones, J.-P. Ziesel, *Cold collisions of electrons with molecules*, Few-Body Systems (2002) sous presse.
- [C25] D. Field, S. L. Lunt, N. C. Jones, J.-P. Ziesel, *Cold collisions of electrons with molecules: virtual state scattering in CO<sub>2</sub>*, A.I.P. Conference Proceedings (2002) sous presse.
- [C26] F. Brandi, M. Bregant, G. Cantatore, F. Della Valle, S. Carusotto, G. Di Domenico, U. Gastaldi, E. Milotti, R. Pengo, E. Polacco, C. Rizzo, G. Ruoso, E. Zavattini, G. Zavattini, Optical production and detection of dark matter candidates, Proc. of the Frontier Detectors for Frontier Physics, 8th Pisa Meeting on Advanced Detectors, Isola d'Elba, Italie, Mai 2000, NIMA à paraître.

### 10.3. Conférences Invitées dans les congrès internationaux

1998

1. Ph., Poncharal, J.M L'Hermite, I. Reiche, F. Spiegelmann, G. Durand, M. Sence, P. Labastie, 6th EPS Conference on Atomic and Molecular Physics ECAMPS, Siena 14-18 Juillet 1998, Italie.
2. P. Labastie, F. Calvo, Several ways to compute the density of states for clusters, Workshop Atomic clusters, INT, Seattle (USA) Août 1998.
3. C. Champenois, P. Duplaa, E. Audouard, M. Büchner, G. Trenec, J. Vigué, Index of refraction of gases for atomic waves, 3<sup>rd</sup> European Meeting of the molecular beam dynamics Group : Molecular Physics of Structure Change, Lunteren, Pays Bas 2-4 Sept. 1998
4. G. Bazalgette, G. Trenec, E. Audouard, M. Büchner, J. Vigué, Oriented ICl molecules probed by photodissociation, Colloque Franco-Taiwanais : dynamique moléculaire, Orsay, 12-14 Octobre 1998
5. P. Moretto-Capelle, 9<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Highly Charged Ions (Bensheim, Allemagne, 1998): « *Multiple capture investigated by coincident electron spectroscopy in  $X^{7+} + Ar$ , at 70 keV* »
6. V. Blanchet, C. Nicole, N. Melikechi, M. A. Bouchene, B. Girard, H. Ruppe, S. Rutz, E. Schreiber et L. Wöste, "Temporal coherent control by wave packet interferences in one and two photon atomic transitions," présenté à Deutschen Physikalischen Gesellschaft conference, Konstanz (Allemagne), 16 - 19 mars 1998.
7. V. Blanchet et A. Stolow, "Time-resolved Photoelectron Spectroscopy," présenté à S.P.I.E. Conference 3271, "Laser Techniques for State-Selected and State-to-State Chemistry IV", San Jose, California, 29-31 janvier 1998
8. V. Blanchet et A. Stolow, "Time-resolved Photoelectron Spectroscopy," présenté à CLEO, San Francisco, California, May 1998.
9. V. Blanchet et A. Stolow, "Time-resolved Internal Conversion," présenté à Ultrafast Phenomena, Garmisch-Partenkirchen, Germany, 12-17 July 1998.
10. V. Blanchet et A. Stolow, "Femtosecond Time-resolved Internal Conversion," présenté à Canadian Society for Chemistry, Physical & Theoretical Chemistry Division, Symposium on "Reaction Dynamics in the Energy & Time Domains", Whistler, BC (Canada), juin 1998.
11. V. Blanchet et A. Stolow, "Femtosecond Time-resolved Internal Conversion," présenté à Multiphoton Processes Gordon Conference, Tilton School, Tilton, New Hampshire, USA, Juin 1998.
12. B. Girard, C. Nicole, V. Blanchet, M. A. Bouchene, T. Amand, X. Marie, P. Le Jeune, J. Barrau et M. Brousseau, "Optical And Quantum Interferences In Temporal Coherent Control ?," présenté à CMD-EPS 17 (Condensed Matter Division of the European Physical Society) and JMC6 (Les Journées de la Matière Condensée de la Société Française de Physique), Grenoble, 25-29 Août 1998.
13. B. Girard, C. Nicole et M. A. Bouchene, "Temporal Coherent Control In Alkali Atoms and Molecules," présenté à 21<sup>st</sup> International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Marseille, 26-31 July 1998.
14. C. Meier, Symposium on Theories of Quantum Dissipation, Rehovot, Israël, Février 1998.
15. J.-A. Beswick, Conférence Ibérique de Physique, Coimbra, Mai 1998.

16. C. Meier, Journée de Spectroscopie Moléculaire et 3ème DIAM, Reims, Juillet 1998.
  17. J.-A. Beswick, MOLEC XII, Bristol, Septembre 1998.
  18. J.-A. Beswick, Colloque France-Taiwan, Orsay, Octobre 1998.
  19. J.-A. Beswick, 6ème réunion de Chimistes Théoriciens, Lille, Octobre 1998.
  20. D. Field, S. L. Lunt, J.-P. Ziesel, Do PAHs soakup electrons in the interstellar medium? New experimental results, The physics and chemistry of the interstellar medium, 3rd Cologne-Zermatt Symposium, Zermatt, Suisse (1998).
  21. R. Mathevet, K. Brodsky, F. Perales, K. Rubin, J. Robert, J. Baudon, Some new effects in atom Stern-Gerlach interferometry, Symposium on elementary chemical processes, Perugia, Italie, Juillet 1998
  22. R. Mathevet, K. Brodsky, F. Perales, K. Rubin, J. Robert, J. Baudon, Some new effects in atom Stern-Gerlach interferometry, 21st Rarefied gas dynamics symposium, Marseille, Juillet 1998
  23. F. Perales, R. Mathevet, K. Brodsky, F. Perales, K. Rubin, J. Robert, J. Baudon, Developments in atomic Stern-Gerlach interferometry, 7th workshop on laser physics, Berlin, Allemagne, Juillet 1998
  24. J. Weiner, Ultracold Collisions in Traps and Beams, Fifth International Workshop on the Physics, Modern Applications of Lasers, Gaborone, Botswana, 3-7 Août 1998
  25. J. Weiner, What precision molecular spectroscopy can you tell you about atomic structure, Sixth International Conference on Interdisciplinary Topics in Science "End of Century State of Science" Brijuni, Croatie, 7-11 Septembre 1998
  26. J. Weiner, Ultracold Collisions and the cold molecule formation, Workshop on Spectroscopy and Applications, Dakar, Sénégal, 5-11 Décembre 1998
- 1999
27. F. Rabilloud, F. Spiegelmann, P. Labastie. et J.M L'Hermite, TAMC III, Berlin, 5-9 octobre 1999.
  28. M. Büchner, C. Champenois, G. Boisseau, L. Jozefowski, C. Rizzo, J. Vigué, Atomic interferometry with lithium, INFM general meeting, Catania, Italie, 14-18 Juin 1999
  29. M. Büchner, C. Champenois, G. Boisseau, R. Delhuille, L. Jozefowski., C. Rizzo, J. Vigué, Principle and design of an atomic interferometer working with lithium atom, Workshop : Atomic interactions in laser fields, Torun, Pologne 1-3 Septembre 1999
  30. C. Mennerat-Robilliard, R. Mathevet, M. Büchner, J. Vigué, J. Weiner : Nanolithographies par forces radiatives, Atelier Surfaces et interfaces, Porquerolles 27 Septembre-1<sup>er</sup> Octobre 1999
  31. J. Weiner, Nanoprobes activées par la lumière - applications en imagerie et en lithographie, Optique Atomique et ses Applications, Les Houches, 23-28 Mai 1999
  32. J. Weiner, Colloque : Lasers, mesures de précision et optique quantique, Les Houches, 26 Septembre-1<sup>er</sup> Octobre 1999
  33. V. Blanchet et A. Stolow, "Femtosecond Time-resolved Internal Conversion," présenté à Femtochemistry conference, Leuven, Belgique, July 1999
  34. V. Blanchet et A. Stolow, "Femtosecond Time-resolved Internal Conversion," présenté à South European Conference On Atomic And Molecular Physics, Gandia, Valencia (Espagne), Juin 1999.

35. V. Blanchet, M. Z. Zgierski, T. Seideman et A. Stolow, "Time Resolved Configuration Interaction in all trans decatetraene," présenté à 217th American Chemical Society National Meeting. Symposium on Linear Conjugated Polyenes., Anaheim, California, 21-25 March 1999.
36. V. Blanchet, M. Z. Zgierski, T. Seideman et A. Stolow, "Disentangling electronic from vibrational dynamics in ultrafast internal conversion," présenté à Canadian Society for Chemistry Conference, Toronto, Ontario, 30 May - 2 June 1999
37. V. Blanchet, M. Z. Zgierski, T. Seideman et A. Stolow, "Disentangling electronic from vibrational dynamics in ultrafast internal conversion," présenté à 1st Cross Border Workshop on Laser Science (NRC), Ottawa, Ontario, 20-22 May, 1999
38. B. Girard, "Pump-probe spectroscopy and coherent control in alcoli atoms and dimers," présenté à HighRus -99 13th International Symposium And School On High Resolution Molecular Spectroscopy, Moscow, 4-10 juillet 1999.
39. J.-P. Daudey, Théorie et spectroscopie , Garchy, France, 6-10 Novembre 1999
40. N. Lorente, European Research Conferences: Particle-Solid Interactions: Dynamic Phenomena, San Sebastián, Spain, September 1999.
41. N. Lorente, Twelfth International Workshop on Inelastic Ion-Surface Collisions, South Padre Island, Texas, USA, January 24 to 29, 1999.
42. J. Robert, J. Baudon, R. Mathevet, B. Viaris de Lesegno, M. Boustimi, K Brodsky, F. Perales, Longitudinal, angular coherences in Stern-Gerlach atom interferometry, Amel, Pays Bas, 1999
43. R. Mathevet, K Brodsky, M. Boustimi, B. Viaris de Lesegno, M. Gorlicki, F. Perales, J. Reinhart, , J. Baudon, J. Robert, Atomic gradiometer with comoving fields, Rencontres de Moriond, France, 1999
44. J. Weiner , Polarisation studies of cold collisions within a slow, bright atom beam, Workshop on Prospects of Cold Molecules, 8-10 November 1999, International Science Forum, Heidelberg, Allemagne, 8-10 Novembre 1999

2000

45. F. Spiegelmann, F. Rabilloud, P. Labastie et J.M L'Hermite, Gordon Conference on Molecular and Ionic Clusters MIC2000, Toulouse, 16 avril 2000.
46. P. Labastie, International Workshop on Phase transitions in finite systems, ECT\*, Trente (Italie), Septembre 2000.
47. R. Delhuille., C. Champenois, M. Büchner, L. Jozefowski, Th. Lahaye, R. Mathevet, A. Miffre, C. Rizzo, C. Robilliard, G. Trenec, J. Vigué, Some theoretical and experimental aspects of three-grating Mach-Zehnder atom interferometers, 6th Atom Optics and Interferometry Workshop, Cargese, France, 26-29 juillet 2000
48. J. Weiner, Atomic manipulation by force fields and the promise of 'bottom-up' nanostructure fabrication, Seventh International Conference on Interdisciplinary Topics in Science « Important Problems for the XXI Century », Brijuni, Croatie 28 Août-2 Septembre 2000
49. R. Delhuille., C. Champenois, M. Büchner, R. Mathevet, C. Rizzo, C. Robilliard, J. Vigué Atom interferometry : principles and applications to fundamental physics, Workshop QED 2000 : Quantum electrodynamics and the physics of vacuum, Trieste, Italie, 5-11 Octobre 2000

50. S. Askenazy, J. Billette, P. Dupre., P. Ganau, J. Mackowski, J. Marquez, L. Pinard, O. Portugall, D. Ricard, G.L.J.A. Rikken, C. Rizzo, G. Trenec, J. Vigué, A 25 T dipole pulsed magnet to study the magnetic birefringence of vacuum : the BMV project, Workshop QED 2000 : Quantum electrodynamics and the physics of vacuum, Trieste, Italie, 5-11 Octobre 2000
51. P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu et A. Bordenave-Montesquieu, Colloque de la division de physique atomique, moléculaire et optique de la SFP (PAMO 2000, Villeurbanne, juillet 2000): « Emission d'électrons et fragmentation dans les collisions ions-C<sub>60</sub> »
52. P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu et A. Bordenave-Montesquieu, 10<sup>th</sup> Int. Conf. Physics of Highly Charged Ions (Berkeley, USA, août 2000): "Interaction of multicharged ions with molecules (CO<sub>2</sub>, C<sub>60</sub>) by coincident electron spectroscopy"
53. B. Girard, "Techniques de contrôle cohérent en régime femtoseconde," présenté à FEMTO 2000, St Etienne, 3 - 6 octobre 2000.
54. B. Girard, "Contrôle cohérent et contrôle optimal," présenté à PAMO 2000, Lyon, 10-13 juillet 2000.
55. B. Girard, O. Björneholm, I. Hjelte, J. Andersson, S. Sorensen, J. Norin, J. Mauritson, A. Lhuillier, C. G. Wahlström, D. Gauyacq, S. Zamith et V. Blanchet, "Harmonics as a tool in molecular physics," présenté à Workshop on Applications of High-Order Harmonics, Lund (Sweden), 17-18 march 2000.
56. B. Girard, S. Zamith, J. Degert, C. Nicole, E. Sokell, V. Blanchet, M. A. B. Bouchene et B. de Beauvoir, "Ultrashort wavepacket dynamics and control in alkali atoms," présenté à COCOMO startup meeting, Kaiserslautern, 13 - 15 avril 2000.
57. B. Girard, S. Zamith, J. Degert, C. Nicole, E. Sokell, V. Blanchet, M. A. B. Bouchene et B. de Beauvoir, "Ultrashort wavepacket dynamics and interferences in alkali atoms," présenté à Ultraintense Laser Interactions and Applications (ULIA 2), Pisa (Italy), 29 sept. - 3 oct. 2000.
58. Daudey J.-P., Formation modélisation CEA/CNRS , Méjeannes la Clape, Septembre 2000.  
Daudey J.-P., 3<sup>ième</sup> réunion ISTCTP, Mexico, Novembre 2000
59. N. Lorente, Future developments in the Study of structure-property relations by 'computational crystallography', Lyon, October 2000.
60. N. Lorente, Yk 2000 conference: Ab-initio (from Electronic Structure) Calculations of Complex Processes in Materials, Schwäbisch, Gmünd, Germany, August 2000.
61. C. Meier, Dynam 2000, Arcachon, Juin 2000.
62. J.-A. Beswick, Forst International meeting on photodynamics, La Havana, Cuba, février 2000.
63. J. Weiner, What cold collisions have told us about atomic structure, Bose-Einstein condensates, and the promise of cold-molecule studies, American Chemical Society Symposium on Very Low Temperature Spectroscopy and Dynamics, Washington, USA, 20-25 Août 2000
64. J. Weiner, Spin-polarized photoassociation and beam-loss spectroscopy in an intense, slow, bright atom beam, Workshop on Prospects of Cold Molecules II, St. Martins, Graz, Autriche, 13-15 Novembre 2000

2001

65. G. Lévêque, Diffraction d'atomes froids par champ optique confiné, Ecole de Nanoscience, Dijon, 18 Juin 2001
66. R. Delhuille., C. Champenois, M. Büchner., L. Jozefowski, C. Rizzo, G. Trenec, J. Vigué, Interférométrie sur un jet d'atomes de lithium, Journées du GREX 2001, Grasse, 9-11 Octobre 2001
67. P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu, A. Rentenier et A. Bordenave-Montesquieu, 11<sup>th</sup> International Seminar on Ion-Atom Collisions (ISIAC) (Ensenada, Mexique, 2001): « Deposited energy and fragmentation of C<sub>60</sub> induced by ion impact. »
68. A. Le Padellec, International Symposium on the Dissociative Recombination of Molecules with Electrons: Theory, Experiment, and Applications, « Electron collision studies on CN<sup>+</sup>, HCN<sup>+</sup>/HNC<sup>+</sup>, CN<sup>-</sup> and C<sub>4</sub><sup>-</sup> », conférence invitée (Chicago 26-30 août 2001)
69. A. Bouchène, S. Zamith et B. Girard, "Spin polarised electrons produced by a sequence of two femtosecond pulses. Calculation of differential and global polarisation rates," présenté à V<sup>èmes</sup> Journées de Phénomènes ultrarapides, Grenoble, 31 mai - 1<sup>er</sup> juin 2001.
70. A. Bouchène, S. Zamith et B. Girard, "Spin polarised electrons produced by a sequence of two femtosecond pulses. Calculation of differential and global polarisation rates," présenté à Molecular Beams, Rome, Juin 2001.
71. J. Degert, B. de Beauvoir, C. Meier et B. Girard, "Quantum information processing with a dissociating molecule," présenté à COCOMO Network Meeting, London, 23 - 25 avril 2001.
72. B. Girard, "Coherent Control in Atomic and Molecular Processes," présenté à COLLELSOL (Colloque sur les Applications du Laser à Electrons Libres sur SOLEIL), Paris, 25-26 sept 2001.
73. B. Girard, "Coherent Control in Atomic and Molecular Processes," présenté à French - Chinese workshop on Molecular Dynamics, Gif sur Yvette, 16-17 oct 2001.
74. B. Girard, B. de Beauvoir, J. Degert, C. Meier et M. Vrakking, "Coherent Control of the fragment distribution of a predissociating molecule," présenté à Cold Molecules 2001 : Coherent Control and Cold Molecules, Gif-sur-Yvette, 21-25 oct 2001.
75. B. Girard, S. Zamith, J. Degert, V. Blanchet, M. A. B. Bouchene et B. de Beauvoir, "Ultrashort wavepacket dynamics and coherent control in alkali atoms," présenté à ECAMP 7, Berlin, 1-6 Avril 2001.
76. B. Girard, S. Zamith, J. Degert, S. Stock, A. Montmayrant, V. Blanchet et B. de Beauvoir, "Coherent Control of Atomic Systems with Chirped Pulses," présenté à 2<sup>nd</sup> workshop on Optimal Control of Quantum Dynamics, Ringberg Schloss (München), 9-12 déc 2001.
77. S. Zamith, V. Blanchet, B. Girard, J. Norin, J. Mauritson, A. Lhuillier, J. Andersson, S. Sorensen, I. Hjelte, O. Björneholm et D. Gauyacq, "Ultrafast dynamics of highly excited states of acetylene," présenté à Analysis and Control of ultrafast photoinduced reactions, Berlin, 22-25 nov 2001.
78. S. Zamith, V. Blanchet, B. Girard, J. Norin, J. Mauritson, A. Lhuillier, J. Andersson, S. Sorensen, I. Hjelte, O. Björneholm et D. Gauyacq, "Ultrafast processes in excited molecules analysed by VUV femtosecond time-resolved photoelectron spectroscopy," présenté à 17Th Interdisciplinary laser science conference, Optical Society of America, Long Beach, California, oct. 2001.

79. S. Zamith, J. Degert, A. Monmayrant, S. Stock, I. Bloch Nielsen, B. de Beauvoir, V. Blanchet, A. Bouchène et B. Girard, "Manipulation de systèmes quantiques par manipulation d'impulsions lasers," présenté à V<sup>èmes</sup> Journées de Phénomènes ultrarapides, Grenoble, 31 mai - 1<sup>er</sup> juin 2001.
  80. S. Zamith, B. de Beauvoir, J. Degert, V. Blanchet, M. A. B. Bouchene et B. Girard, "Coherent transients in Rb excited with chirped pulses," présenté à COCOMO Network Meeting, London, 23 - 25 avril 2001.
  81. Daudey J.-P., European Conference on Heavy Metals, Kerckrade (Hollande) Avril 2001
  82. Daudey J.-P., Rencontre modelisation CEA , Saclay Juin 2001.
  83. Daudey J.-P., International workshop on modelisation, CEA, Saclay 21-22 Janvier 2001.
  84. Daudey J.-P., Journée thématique Théorie et spectroscopie des radicaux , Marseille Luminy, Septembre 2001
  85. Daudey J.-P., 7<sup>ième</sup> Université d'été de PhysicoChimie Théorique, Aussois, France, 30 Septembre- 5 Octobre 2001
  86. C. Meier, Post graduate Course on Theoretical Chemistry and Spectroscopy, Han-sur-Lesse, Belgique, Décembre 2001.
  87. N. C Jones, S. L. Lunt, D. Field, J.-P. Ziesel, R. J. Gulley, Very low energy electron scattering in nitromethane, nitroethane and nitrobenzene, Symposium on Low Energy Electron-Molecule Interactions, Kitzbuhel, Autriche (2001).
  88. D. Field, S. L Lunt, N. C. Jones, J.-P. Ziesel, Cold collisions of electrons with molecules: virtual state scattering in CO<sub>2</sub>, 22<sup>th</sup> International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Santa Fe, USA (2001).
  89. D. Field, S. L Lunt, N. C. Jones, J.-P. Ziesel, Cold collisions of electrons with molecules, Colloquium on Dynamics and structure of critically stable quantum few-body systems, Les Houches (2001).
  90. J. Weiner, Cold collisions and what they tell us about Bose-Einstein condensates in real gase, Quantum Optics Summer School, Bonn, Allemagne, 18-31 Août 2001
- 2002
91. J. Weiner, Atom manipulation and nanostructure fabrication, International Conference on « Current Developments in Atomic, Molecular and Chemical Physics with applications », Delhi, Inde, 20-22 Mars 2002
  92. N. Lorente, Yk 2002 workshop: Total energy methods in Computational Condensed Matter, La Laguna, Tenerife, Spain, January 2002.

## 10.4. Statistiques sur les publications de l'Unité

Année	Publications dans revues avec Comité de lecture		Conférences invitées	
	a	b	a	b
1998	25	30	20	6
1999	25	22	15	3
2000	26	14	19	2
2001	39	5	25	1

a = Publications correspondant à un travail au laboratoire

b = Publications correspondant à un travail effectué avant son arrivée au laboratoire par une personne récemment recrutée