

Séminaire

“Chimie froide et astrochimie : entre calculs *ab initio*, dynamique collisionnelle et simulations Monte Carlo”

Dr. G. GUILLON

Institut de Physique – UMR 6251
Université de Rennes, France

Mardi 14 décembre 2010 – 11 heures

Salle RAPHAEL 2&3 – [site d’Ivry-sur-Seine](#)

Lors de cette présentation, je parlerai successivement de trois exemples se rapportant aux thématiques de recherche qui m’ont occupé ces dernières années, à savoir l’astrochimie et la chimie froide.

Les calculs de diffusion inélastique en phase gazeuse ont depuis longtemps montré leur utilité en chimie interstellaire pour permettre l’évaluation des abondances moléculaires des principaux constituants des nuages interstellaires. En effet les molécules sont détectées par les raies d’émission de leur spectre rotationnel et il est donc indispensable d’évaluer toutes les causes possibles d’excitation rotationnelle afin de remonter aux abondances moléculaires. L’une de ces causes est constituée par l’excitation collisionnelle due aux constituants les plus abondants des nuages interstellaires à savoir H, He et H₂. Dans ce cadre, nous nous concentrerons sur la collision H₂ – HF.

Avec l’avènement de la condensation de Bose-Einstein de molécules diatomiques et les perspectives prometteuses d’obtention de molécules ultra froides de tailles de plus en plus importantes, il semble que nous entrons dans l’ère du contrôle des entités moléculaires individuelles. Des champs externes électriques et magnétiques permettent de manipuler et de contrôler les collisions inélastiques, les réactions chimiques et la dissociation des entités chimiques ultra froides. Le contrôle par des champs extérieurs de la dynamique moléculaire dans le régime ultra froid est une alternative importante au contrôle cohérent des processus moléculaires, à l’étude dans plusieurs domaines de la chimie. Nous étudierons en relation avec cette thématique la collision He + N₂⁺ (²Σ_g⁺).

Enfin, toujours dans le domaine de la chimie froide, nous nous tournerons vers l’étude théorique des nano gouttes d’hélium, dopées en particulier par des atomes ou dimères d’alcalins. Les « impuretés » introduites dans les nano gouttes permettent de sonder les propriétés superfluides de l’hélium à l’échelle moléculaire. De plus, les nano gouttes constituent un environnement idéal pour la spectroscopie rovibrationnelle de certaines molécules, présentant à la fois les avantages de la spectroscopie en phase gazeuse (l’hélium étant un environnement peu perturbant) et de la spectroscopie d’espèces instables en milieu confiné (les gouttelettes d’hélium jouant le rôle de matrice de confinement). De précieuses informations structurales sur les « exciplexes » ainsi formés sont obtenues par des méthodes Monte Carlo quantiques (DMC, PIMC).