



Contribution ID: 184

Type: **Orale**

Migration de charges au sein de l'acide propiolique et son déphasage dû au couplage avec les mouvements nucléaires

Wednesday, 10 July 2019 15:30 (15 minutes)

Du fait de la corrélation électronique, l'ionisation d'un système moléculaire peut mener à une dynamique de charges ultrarapide connue sous le nom de migration de charges. Une interrogation actuelle est de savoir si ces dynamiques survivent suffisamment longtemps pour être observées ou si la dynamique nucléaire mène à une décohérence rapide empêchant la charge de migrer. Dans le but d'apporter un éclairage à cette interrogation, nous avons étudié les migrations de charges existantes pour l'acide propiolique.

En utilisant la méthode ADC(3), nous avons identifié une migration de charges apparaissant au sein de cette molécule après l'ionisation de son HOMO. Cette dynamique consiste en une oscillation de la charge entre la triple liaison carbone et l'oxygène carbonyle de la molécule avec une période de 6,2 fs. L'impact de la dynamique nucléaire a ensuite été introduit en utilisant un Hamiltonien de couplage vibronique. La méthode MCTDH a été utilisée pour réaliser une simulation purement quantique de cette dynamique couplée électro-nucléaire, en tenant compte de l'ensemble des 26 électrons de valence de la molécule, de l'ensemble de ces 15 degrés de liberté nucléaires ainsi que des 4 états cationiques présents dans la région d'énergie concernée. La migration de charges survie à la décohérence induite par la dynamique nucléaire suffisamment longtemps pour être observée et contrôlée. Ainsi cette molécule peut être un bon choix pour l'étude expérimentale des migrations de charges.

Choix de session parallèle

4.4 Physique à l'échelle de l'atto-seconde

Primary authors: Dr DESPRÉ, Victor (Universität Heidelberg); Dr GOLUBEV, Nikolay V. (Universität Heidelberg); Dr KULEFF, Alexander I. (Universität Heidelberg)

Presenter: Dr DESPRÉ, Victor (Universität Heidelberg)

Session Classification: Séance Parallèle