



SEMINAIRE LIDyL / LFP

Morgane VACHER

Department of Chemistry, Imperial College London, United Kingdom

Le Lundi 16 Juin 2014 à 11h00
Bâtiment 522 - Salle 138

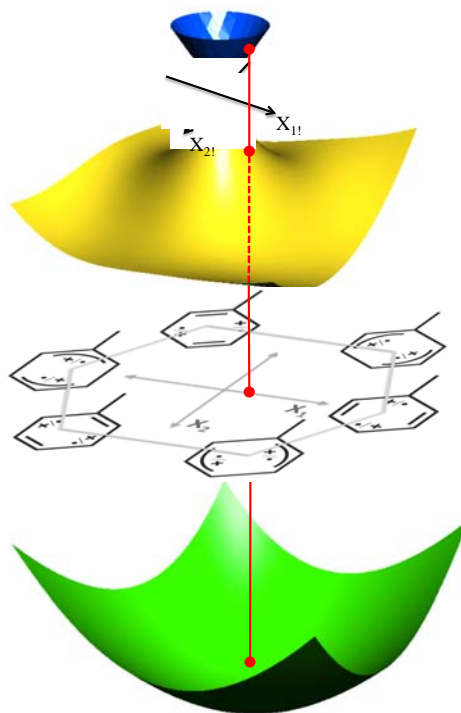
s a c l a y

« Coupled electron-nuclear dynamics following photoionisation of benzenes »

Photoionisation can create a coherent superposition of electronic states and therefore initiates electronic dynamics in atoms and molecules. Observing and controlling this experimentally is a target of attosecond spectroscopy. Theoretical studies of pure electron dynamics at a fixed nuclear geometry have demonstrated oscillatory charge migration [1-2].

Using a CASSCF implementation of the Ehrenfest method [3], we can study the evolution of a non-stationary electronic wavefunction for fixed atomic nuclei, and where the nuclei are allowed to move, to investigate the differences [4]. We choose the benzene cation as a prototype because ionising the neutral species leads to a Jahn-Teller degeneracy between ground and first excited states of the cation.

Our calculations have explicitly shown how changing the initial electronic wavefunction can control nuclear dynamics for an ionised molecule where multiple electronic states are close in energy. We have also been able to show how chemical substitution of the benzene cation affects the outcome of the electronic dynamics.



[1] F. Remacle, R. D. Levine, *Z. Phys. Chem.* **221**, 647-661 (2007)

[2] J. Breidbach, L. S. Cederbaum, *J. Chem. Phys.* **118**, 3983-3996 (2003)

[3] M. Vacher, D. Mendive-Tapia, J. Bearpark, M. A. Robb, *Theo. Chem. Acc.* Accepted (2014)

[4] D. Mendive-Tapia, M. Vacher, M. J. Bearpark, M. A. Robb, *J. Chem. Phys.* **139**, 044110 (2013)

Formalités d'entrée :

Visiteur U.E. : Se faire connaître au moins 48 heures à l'avance pour l'établissement de votre autorisation d'entrée sur le Centre de Saclay.

Visiteur hors U.E. : Se faire connaître au moins 4 jours à l'avance pour les formalités d'entrée et se faire accompagner par un agent CEA.

Sans autorisation, vous ne pourrez entrer sur le Centre de Saclay. Tél. : 33.1.69.08.30.95 - Fax : 33.1.69.08.76.39 - email : caroline.lebe@cea.fr ou veronique.gereczy@cea.fr

Dans TOUS LES CAS, se munir d'une pièce d'identité (passeport et carte d'identité - pas de permis de conduire)