

## Techniques de frustration de fluorescence dans le VUV : Effet du couplage spin-orbite dans l'excimère de krypton

M. Hemici, R. Saoudi, E. Descroix, E. Audouard et P. Laporte

Laboratoire Traitement du Signal et Instrumentation, URA 842 du CNRS, 23 rue du Dr Paul Michelon, 42023 Saint-Etienne cedex 2, France

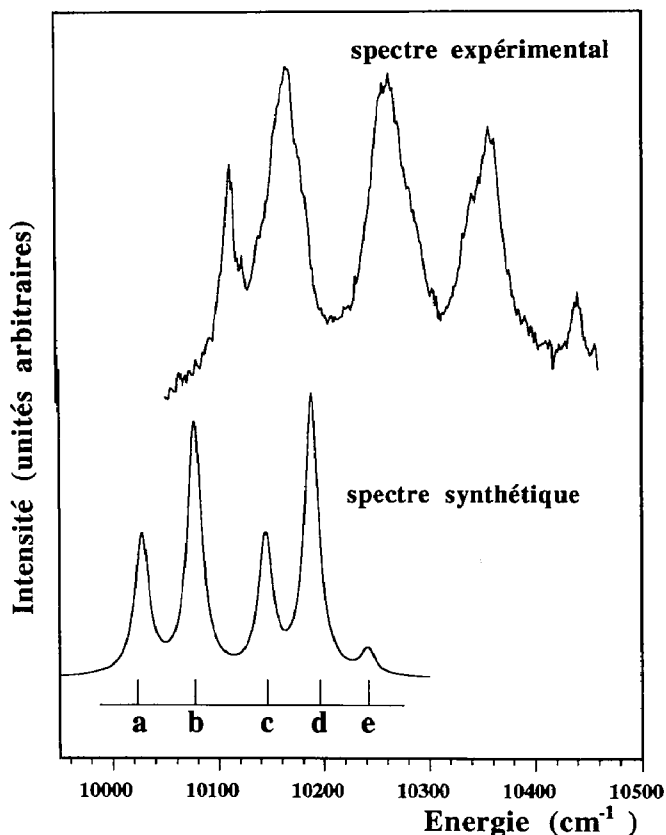
**Résumé:** La frustration de la fluorescence VUV de l'excimère de krypton permet de sonder les états moléculaires de  $\text{Kr}_2^*$  dans le domaine de longueur d'onde 955-995 nm. Le calcul *ab initio* d'un spectre synthétique a permis l'attribution des bandes observées sans ambiguïté. Ces résultats permettent de mettre en évidence l'effet du couplage spin-orbite dans les gaz rares lourds.

**Abstract:** The Laser Reduced VUV fluorescence of krypton excimer allows to probe molecular states in the infrared wavelength range. A clear assignment is obtained by using a comparison of the five observed bands with *ab initio* calculated spectra. The effect of the spin orbit coupling in heavy rare gas is thus evidenced

Dans les dernières années, un large effort à la fois théorique et expérimental a permis un progrès déterminant dans la compréhension des structures moléculaires des excimères de gaz rares et particulièrement de  $\text{Kr}_2^*$ <sup>1,2</sup>. Dans ce cadre général, nous présentons une contribution expérimentale basée sur la mise en oeuvre de techniques particulièrement adaptées à l'étude de ces molécules, qu'il n'est pas possible d'étudier directement depuis l'état de base répulsif à courte distance internucléaire, ainsi qu'une analyse théorique fondée sur les résultats du calcul *ab initio* des potentiels moléculaires<sup>3</sup>.

La nature prédissoziée des états sondés à courte distance internucléaire et les absorptions atomiques résiduelles rendent délicate l'obtention de spectre d'absorption moléculaire. La mise en oeuvre de techniques de détection de la frustration de la fluorescence VUV du premier état de l'excimère  $^3\Sigma_u^+(1_u0_u^-)$  a permis d'obtenir de tels spectres. Dans ce travail, nous étudions les transitions moléculaires entre  $^3\Sigma_u^+(1_u0_u^-)$  vers les premiers états de symétrie g ( $^3,^1\Pi_g$ ) associés à des puits de potentiels semblables au puits de l'état de départ. Après couplage spin-orbite, ces états se décomposent en cinq états différents notés  $0_g^+$ ,  $0_g^-$ ,  $2_g$  et deux notés  $1_g$ . Les transitions lié-lié correspondantes se situent dans le domaine de l'infrarouge (autour de 970 nm). Le dispositif expérimental permet d'obtenir une résolution de  $0.2 \text{ cm}^{-1}$  dans un domaine de pression allant de 150 à 2000 hPa. Un exemple de spectre obtenu est présenté sur la figure 1. Le spectre théorique est obtenu par un calcul des facteurs de Franck-Condon associés aux résultats du calcul *ab initio* des moments de transition, et la prise en compte, d'une façon semi-empirique, d'une largeur de prédissociation. La confrontation théorie expérience illustre la bonne précision du calcul *ab initio* et

précision du calcul *ab initio* et permet l'attribution non ambiguë des cinq raies observées à des transitions depuis  $^3\Sigma_u^+(1_u0_u^-)$  vers les cinq états g attendus. Une analyse à plus haute résolution montre que la transition dont l'énergie est la plus faible correspond à un état peu prédissocié de la molécule. Une analyse en terme de transitions vibroniques est alors possible, un tel travail est en cours.



**Figure 1:** Comparaison des spectres expérimental et synthétique autour de 970 nm. La pression est de 400 hPa et la résolution spectrale est de  $0.7 \text{ cm}^{-1}$ . Les lettres a, b, c, d, e repèrent les transitions depuis l'état  $^3\Sigma_u^+(1_u0_u^-)$  vers les états (III) $0_g^-$ , (IV) $1_g$ , (IV) $0_g^+$ , (II) $2_g$ , (V) $1_g$  (notations de la Ref. 3)

#### REFERENCES

- [1] D.J. Kane, C.C. Abele, R.D. Fraser, D.C. Shannon, J.G. Eden and M.L. Ginter, *J. Chem. Phys.* **99**, (1993), 99-112.
- [2] M. Hernici, R. Saoudi, E. Descroix, E. Audouard, and P. Laporte, *J Phys IV, France*, **4**, (1994), C4, 755-758.
- [3] E. Audouard and F. Spiegelmann, *J. Chem. Phys.* **94**, (1991), 6102-6124.