

L. Manceron B. Tremblay  
D. Carrère D. Danset  
E. Klécha

## Aspects Expérimentaux

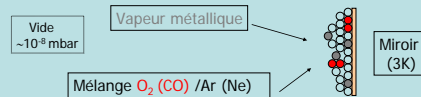
M. E. Alikhani B. Madebène  
S. M. O. Souvi F. Allouti  
N. Berkaine B. Kiani

### MOTIVATIONS

- Étudier les mécanismes réactionnels fondamentaux d'atomes ou de dimères métalliques
- Données nécessaires pour confirmer la modélisation quantochimique ou pour aider à l'identification d'espèces supportées

### SYNTHÈSE DES ÉCHANTILLONS

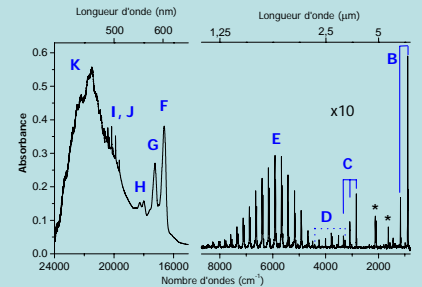
- Principe : Co-dépôt de la vapeur d'atomes métalliques et du mélange gazeux sur un miroir froid



### Photo-excitation

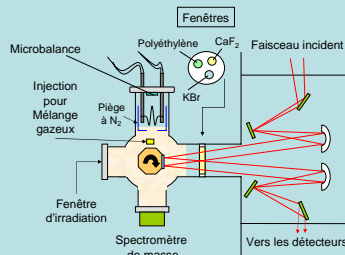
- lampes IR et UV-visible
- filtres divers
- laser OPO accordable
- 4300 - 25 000 cm<sup>-1</sup>

Exemple: Observation de 10 transitions électroniques de l'IR au visible dans Co<sub>2</sub> → 10 états excités de 0,07 à 2,5 eV



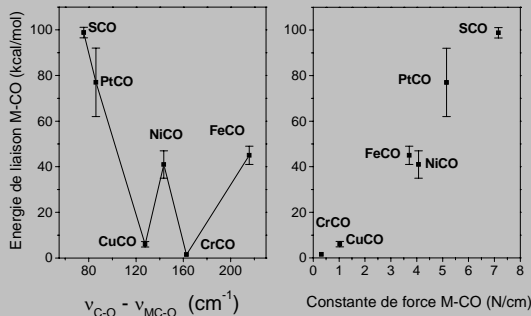
### Spécificités fondamentales du système

- Domaine sondé: 30 - 30 000 cm<sup>-1</sup>
- IR lointain au visible sur le même échantillon
- Résolution 0,5 - 0,01 cm<sup>-1</sup>
- Grâce aux spectres UV-Visible et proche IR, on connaît les zones d'adsorption électronique des molécules



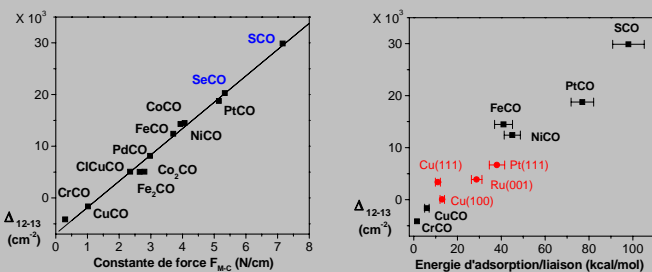
### Molécules étudiées: FeCO, CrCO, Ni(N<sub>2</sub>)<sub>4</sub>, Co(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>)<sub>2</sub>

Exemple: les monocarbonyles MCO et M<sub>2</sub>CO



Pour une molécule linéaire contenant un groupement CO, on peut déterminer la relation suivante:

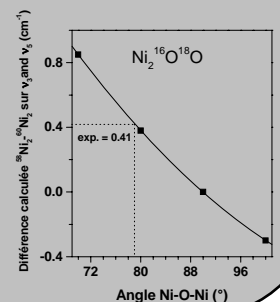
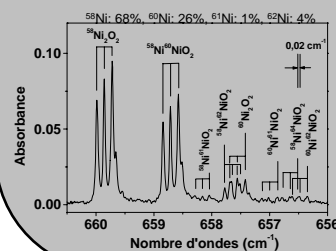
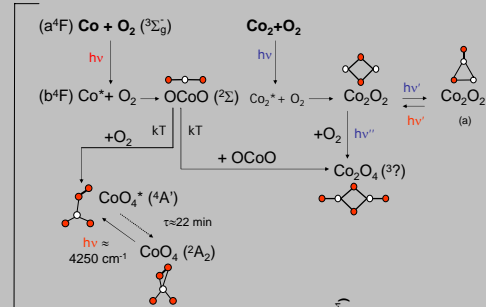
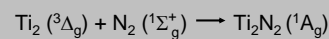
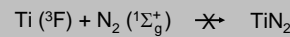
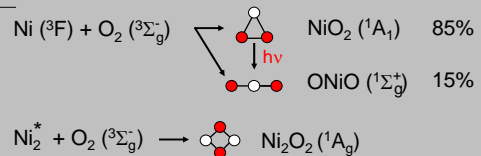
$$\Delta_{12-13} = (\nu_{1216})^2 - 1,046 (\nu_{1316})^2 = -9788 F_{MC,CO} + 5495 F_{MC}$$



⇒ Nouvelle relation reliant les décalages isotopiques sur ν<sub>CO</sub>, la constante de force et l'énergie de la liaison M-CO, applicable également aux espèces adsorbées sur une surface.

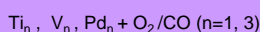
### Systèmes étudiés:

Cu + NO; Ti, Ti<sub>2</sub> + N<sub>2</sub>; Co, Co<sub>2</sub> + O<sub>2</sub>; Ni, Ni<sub>2</sub> + O<sub>2</sub>



### PROJETS

Étudier la réactivité des systèmes:



- Importance des oxydes de vanadium et de titane en catalyse
- Les états électroniques de très basse énergie de Ti<sub>2</sub> sont connus, ce qui permet d'explorer la photochimie

Étudier l'influence du degré d'oxydation du métal

- Composés du type MCl<sub>x</sub>(CO)<sub>x</sub> (x=1,2)
- Réactions MCl + CO ou M + Cl<sub>2</sub> + CO