

CONTRACTS DOCTORAUX 2024

Titre du projet de thèse : Nouvelles méthodes de structure électroniques pour modéliser des excitations à un ou plusieurs photons dans des systèmes moléculaires chirales

Directeur de thèse : Andre SEVERO PEREIRA GOMES

Résumé du projet de thèse (en 20 lignes maximum) :

L'interaction lumière-matière est essentielle pour comprendre les processus physiques à l'échelle microscopique, car la lumière sonde la structure électronique des atomes et des molécules, dans des processus linéaires (impliquant un photon, comme dans l'absorption, la fluorescence, etc.) ou non linéaires (impliquant deux photons ou plus, tels que la génération de second harmonique, l'absorption à deux photons, etc.). Ces dernières années, l'interaction lumière-matière a été appliquée pour comprendre les systèmes chirales car ils ont montré des promesses pour les propriétés opto-électroniques chirales [1]. La chiralité dans ces systèmes peut être intrinsèque, les molécules étant elles-mêmes chirales, ou résulter de l'interaction de molécules non chirales avec des environnements chirales. Une compréhension des propriétés chiroptiques peut être obtenue grâce à la modélisation théorique, par des outils théoriques capables de décrire avec précision les effets de la corrélation électronique et de l'environnement sur la structure électronique de telles structures (supra)moléculaires et leur interaction avec la lumière. Dans des systèmes tels que les perovskites, qui contiennent des éléments lourds tels que le plomb et l'iode, de tels modèles doivent également prendre en compte les effets relativistes [2]. Ce projet vise à développer des méthodes novatrices et des outils informatiques capables de prendre en compte tous ces effets dans la simulation des processus d'excitation à un ou plusieurs photons dans des molécules chirales, ou des molécules achirales dans des environnements chiraux, dans la lignée de nos développements récents sur la structure électronique relativiste [3] et les méthodes d'imbrication quantique [4].

References

[1] G Long et al, *Nature Reviews Materials*, **5**, 423 (2020)

[2] P Schwerdtfeger, OR Smits, P Pyykkö, *Nature Reviews Chemistry* **4**, 359 (2020)

[3] X Yuan, L Halbert, L Visscher, ASP Gomes, *J Chem Theory Comput.* (2023). [arXiv:2309.07295](https://arxiv.org/abs/2309.07295) [4] M De Santis et al, *J Chem Theory Comput.* **18**, 5992 (2022)